

FIZICA CRISTALELOR

I.I. SIROTIN • M.P. ȘASKOLSKAIA



EDITURA
ȘTIINȚIFICĂ
ȘI ENCICLOPEDICĂ

I. I. SIROTIN • M. P. ȘASKOLSKAIA

548
—
860

FIZICA CRISTALELOR

În românește de VIRGIL SPULBER

CUPRINS

Prefață	9
Cuvînt înainte	15
Capitolul 1. Noțiuni fundamentale din cristalografie	19
§ 1. Structura cristalului și rețeaua spațială	19
§ 2. Proiecțiile cristalografice	27
§ 3. Elemente de simetrie simple, finite, ale cristalelor	32
§ 4. Categorii, sisteme și singonii cristalografice	49
§ 5. Grupuri (clase) punctuale de simetrie a cristalelor	54
§ 6. Deducerea și descrierea celor 32 de clase de simetrie ale cristalelor (celor 32 grupuri punctuale de simetrie)	61
§ 7. Grupuri de simetrie limită (grupuri Curie)	76
§ 8. Simetria structurii cristalelor	79
§ 9. Combinațiile elementelor de simetrie ale structurilor. Rețelele Bra- vais. Generarea unor noi elemente de simetrie	83
§ 10. Cele 230 de grupuri spațiale de simetrie	95
§ 11. Baza vectorială reciprocă și rețeaua reciprocă	101
§ 12. Indexarea direcțiilor și planurilor din cristale	107
§ 13. Transformarea indicilor la schimbarea sistemului de coordonate	118
§ 14. Complecșii simetric echivalenți ai planurilor și direcțiilor. Formele simple ale cristalelor	132
§ 15. Unele probleme ale cristalografiei geometrice	143
Capitolul 2. Sisteme de coordonate, vectori și tensori	155
§ 16. Ssleme de coordonate carteziene	155
§ 17. Transformări ortogonale	158
§ 18. Tensorii de rangul doi	166
§ 19. Vectorii proprii și valorile proprii ale unui tensor simetric de rangul doi	170
§ 20. Micile variații ale tensorului simetric de rangul doi	176
§ 21. Componente normale și componente tangențiale ale unui tensor simetric de rangul doi	180



§ 22. Simetria exterioară și reprezentarea vectorilor și tensorilor de rangul doi	185
§ 23. Vectori axiali	192
Capitolul 3. Introducere în fizica cristalelor. Proprietățile electrice și proprietățile termice ale cristalelor	200
§ 24. Mediile continue anizotrope	200
§ 25. Principiul simetriei în fizica cristalelor	208
§ 26. Ecuațiile fundamentale ale electrostaticii cristalelor	214
§ 27. Simetria proprietăților dielectrice ale cristalelor	218
§ 28. Cristalul într-un câmp electric omogen	223
§ 29. Câmpul în interiorul unei cavități sferice dintr-un mediu anizotrop	231
§ 30. Câmpurile sarcinii punctuale și dipolului într-un mediu anizotrop	235
§ 31. Piroelectricii.	240
§ 32. Curentul electric continuu în cristale	244
§ 33. Conductibilitatea termică a cristalelor	246
Capitolul 4. Proprietățile optice ale cristalelor	251
§ 34. Undele electromagnetice în cristalele transparente	251
§ 35. Indicatricea optică	256
§ 36. Unde și raze. Principiul dualității. Elipsoidul Fresnel	263
§ 37. Rezolvarea problemei propagării luminii printr-un cristal, pentru un sistem de coordonate arbitrar	268
§ 38. Ecuația Fresnel. Suprafața de undă și suprafața de radiație	273
§ 39. Legătura dintre suprafețele optice din cristale. Refracția conică	279
§ 40. Observarea anizotropiei optice a cristalelor în lumină polarizată	285
Capitolul 5. Simetria tensorilor de rang superior	298
§ 41. Tensorii și pseudotensorii de rang superior	298
§ 42. Simetria internă a tensorilor și legătura duală	302
§ 43. Scirerea tensorilor fără coordonate. Operațiile diferențiale invariante asupra tensorilor.	309
§ 44. Simetria exterioară și reprezentarea tensorilor și pseudotensorilor	312
§ 45. Metoda verificării directe	322
§ 46. Coordonate ciclice. Teorema lui Hermann	329
§ 47. Aplicarea teoriei reprezentărilor grupurilor la problemele de simetrie a tensorilor	337
§ 48. Tensori izotropi și tensori girotropi	351
Capitolul 6. Elasticitatea cristalelor	358
§ 49. Deformări mici ale mediului continuu	358
§ 50. Tensorul tensiunilor	365
§ 51. Legea generalizată a lui Hooke	372

§ 52. Simetria proprietăților elastice ale cristalelor	378
§ 53. Stările tensionate simple	389
§ 54. Încovoierea și torsionarea cristalelor	399
§ 55. Tensiunile termice din cristale	413
§ 56. Unde elastice în cristale	421
Capitolul 7. Termodinamica cristalelor	447
§ 57. Energia internă și potențialul termodinamic al cristalului	447
§ 58. Efectul piezoelectric și simetria lui	455
§ 59. Rezolvarea simultană a ecuațiilor electrostaticii și elastostaticii cristalelor	470
§ 60. Potențiale termodinamice invariante și neinvariante și matricele lor	478
§ 61. Dependența coeficienților termodinamici de condițiile de măsurare	483
§ 62. Unde elastice în cristalele piezoelectrice	490
§ 63. Inegalități termodinamice.	493
§ 64. Schimbarea simetriei cristalelor în cazul unor tranziții de fază de speța a doua	499
§ 65. Modificarea proprietăților fizice ale cristalelor în urma tranzițiilor de fază de speța a doua	507
§ 66. Metodele matematice ale teoriei tranzițiilor de fază	525
Capitolul 8. Simetria magnetică în fizica cristalelor	540
§ 67. Inversia timpului și antisimetria	540
§ 68. Grupurile punctuale ale simetriei magnetice	544
§ 69. Grupurile spațiale ale simetriei magnetice — grupurile Șubnikov	551
§ 70. Simetria magnetică a cristalelor	555
§ 71. Realizarea geometrică a unui grup ortogonal extins	561
§ 72. Tensorii definiți pe grupul ortogonal extins	564
§ 73. Efectul piezomagnetic și efectul magnetoelectric	570
Capitolul 9. Efecte de ordin superior	574
§ 74. Studiul termodinamic al efectelor neliniare	574
§ 75. Efectul piezorezistiv	578
§ 76. Principiul lui Onsager și efectele termogalvanomagnetice	582
§ 77. Efectul electrooptic și efectul piezooptic	592
§ 78. Anizotropia optică artificială a cristalelor	600
§ 79. Polarizarea neliniară în cazul propagării unor unde electromagnetice de intensitate mare	609
§ 80. Generarea armonicelor luminoase. Direcțiile de sincronism	613
§ 81. Activitatea optică a cristalelor	621
§ 82. Activitatea optică artificială	638
§ 83. Activitatea acustică a cristalelor	645

Capitolul 10. Unele probleme generale ale fizicii cristalelor	653
§ 84. Sarcinile experimentale ale fizicii cristalelor	653
§ 85. Problema comparării proprietăților tensoriale ale cristalelor	661
§ 86. Problema alegerii sistemelor de coordonate cristalografice și cris- talofizice standard	667
§ 87. Relații funcționale în fizica cristalelor	673
Anexe	693
A. Sisteme de coordonate cristalografice și cristalofizice	693
B. Rețelele Bravais și matricele cristalografice	699
C. Proprietățile direcțiilor din cristale	704
D. Demonstrația analitică a teoremelor înmulțirii operațiilor de simetrie	708
E. Tensorii invarianți față de grupurile cristalografice și față de grupurile limită	710
F. Forma contrasă de scriere a tensorilor	738
Notațiile mai importante folosite în text	750
Bibliografie	752



PREFATĂ

Editura științifică și enciclopedică ne oferă spre studiu și aprofundare una dintre cele mai complexe monografii sovietice dedicate fizicii corpului solid. Ea vine să completeze, în mod fericit, eforturile unor creații românești (G. Mastacan, *Cristale, minerale, roci*, 1967, Al. Codarcea, *Mineralogia*, vol. I, *Cristalografia*, 1965), sau ale unor traduceri (capitol separat în Ch. Kittel, *Introducere în fizica corpului solid*, 1972, sau lucrarea consacrată integral, I.S. Jeludev, *Simetria și aplicațiile ei*, 1979).

Departe de a fi aridă din punct de vedere matematic, această carte nu ne „înduioșează” însă cu aplicații practice directe, dar ne ajută, pe cei ce lucrăm sau învățăm, în acest domeniu, să vedem cât de vastă este cunoașterea umană pe tărîmul științei și al practicii fizicii cristalelor. De la bun început, vom preciza faptul că autorii se referă numai la acest domeniu al fizicii solidului, domeniu în care proprietățile fizice pot fi descrise cu ajutorul unor legi de simetrie. Cristalele își au aplicații în domenii de vîrf ale tehnologiei epocii noastre. Cine va căuta aplicarea modelelor analizate pentru fenomenele care au loc în materialele necristaline (amorfi, sticle și polimeri solizi) va întâmpina dificultăți de ordin principal, dificultăți care decurg din însăși vastitatea domeniului abordat. Credem, trebuie precizat, că înțelegerea mai complexă a unor astfel de materiale nu se poate realiza fără cunoașterea fenomenelor ce au loc în structuri mai simple, mai „curate”, adică mai lipsite de defecte, cum sînt monocristalele crescute din substanțe pure. Este evident că o asemenea fizică pare a fi o fizică de laborator, similară, într-un anumit mod, rețelei farmaceutice. Dar fără cunoașterea fenomenelor de bază care au loc în monocristale, materiale care posedă ordine la distanță mare, nu ne putem apropia cu înțelegerea de fenomenele care au loc în materialele care se „abat” de la această structură pură (nu și ideală) pînă la o anumită treaptă, deoarece și ea se dovedește a fi imperfectă pe alte niveluri, cum ar fi dezordinea produsă de oscilațiile rețelei.

Cartea de față expune, pe parcursul a 10 capitole, 187 figuri, 114 tabele și 300 citări bibliografice, o analiză (care în multe locuri este și foarte atractivă) a problemelor generale ale simetriei.

cristalelor și, în legătură cu ele, a corelațiilor dintre această simetrie și proprietățile fundamentale ale cristalelor : proprietăți electrice, termice, optice, magnetice precum și probleme generale cum ar fi cele ale termodinamicii cristalelor și legătura cu unele capitole de matematicii superioare.

Teoria și practica cunoașterii proprietăților fizice ale cristalelor au condus la dezvoltarea tehnicilor de creștere a monocristalelor cu proprietăți speciale, al căror corolar a fost nașterea unor domenii noi, aplicative, legate în special de electronică. Menționăm în acest context sintetizarea de noi materiale semiconductoare, magnetice și dielectrice, nașterea și dezvoltarea electronicii cuantice, a optoelectronicii, crearea de noi tipuri de dispozitive cum ar fi detectorii în infraroșu, dispozitivele piezoelectrice, memoriile magnetice și dielectrice ș.a.

Vastitatea domeniului abordat ca și maniera în care a fost scrisă oferă cărții de față un caracter de manual, în sensul tratării detaliate a problemelor, dar și un caracter monografic, în sensul dezvoltării unor idei de către școala sovietică de fizica cristalelor al cărei fondator a fost A. V. Șubnikov.

Înainte de a efectua o trecere în revistă a conținutului dorim să precizăm că această carte se adresează absolvenților de învățământ superior și studenților care sînt familiarizați cu matematicile superioare (calcul diferențial și integral), pot stăpîni în special calculul tensorial și cunosc elementele de bază ale teoriei grupurilor. Vom menționa, de asemenea, că, spre surprinderea noastră, autorii nu folosesc în cea mai mare parte a lucrării unitățile de măsură din sistemul internațional (SI), ci, dimpotrivă, utilizează așa-zisele sisteme „neortodoxe”.

În continuare, vom expune, pe scurt, conținutul capitolelor lucrării fără a intra în detalii, urmînd a semnala acele elemente care constituie esența secțiunilor.

În capitolul întîi sînt prezentate noțiunile fundamentale de cristalografie, cum sînt rețeaua cristalină, elementele și operațiile de simetrie, grupurile de simetrie (punctuale și spațiale), rețeaua directă și rețeaua reciprocă, indicii elementelor cristaline și transformarea lor la schimbarea sistemului de coordonate. Sînt de semnalat cîteva aspecte interesante. Astfel, după N. V. Belov, deși axa de ordinul cinci nu este posibilă în cristale, ea poate exista în structuri biologice, acest fapt reflectînd un mijloc al lor de luptă pentru existență, împotriva „cristalizării” (pietrificării). O noțiune importantă o constituie dreapta polară (în cristale fără centru de simetrie), care posedă proprietăți diferite pentru sensuri diferite (cum ar fi, de exemplu, polarizarea spontană în feroelectrici).

În capitolul al doilea sînt analizate sistemele de coordonate folosite, transformările ortogonale, vectorii și tensorii de ordinul al doilea.

Capitolul al treilea conține analiza proprietăților electrice și termice ale cristalelor în corelație cu simetria. În prima parte sînt scrise ecuațiile electrostaticii cristalelor și expresiile cîmpului electric în cavități pentru sarcini punctiforme și pentru dipoli. Este expusă, de asemenea, o analiză fenomenologică a efectului piroelectric, a curentului electric continuu și a conductibilității termice. Dintre noțiunile importante analizate menționăm suprafața oricărei proprietăți (dilatarea termică, difracția radiațiilor Röntgen, proprietățile optice), principiul general de simetrie (principiul lui Curie). O caracteristică importantă a simetriei generale a cristalelor este aceea că elementele de simetrie ale cauzelor trebuie să existe și în efectele provocate, dar afirmația reciprocă nu este corectă, în sensul că efectele pot avea o simetrie mai ridicată decît cea a cauzelor.

Cîteva proprietăți optice ale cristalelor transparente ($\sigma = 0$) sînt tratate în capitolul al patrulea: propagarea undelor electromagnetice și construirea indicatricei optice, care, la rîndul ei, ajută la stabilirea vitezei de propagare în medii anizotrope, construirea suprafețelor caracteristice pentru tensorii permitivității dielectrice și ai indicelui de refracție, dubla refracție în cristalele uniace cu aplicații pentru o serie de cristale: cuarț, rubin, rutil, ADP, KDP, topaz, sarea Seignette (sarea Rochelle), refracția conică, proprietățile optice ale cristalelor anizotrope în lumină polarizată.

Capitolul al cincilea este consacrat unor probleme de matematică privind simetria tensorilor de rang superior (tensori și pseudotensori de rangul al treilea și al patrulea), simbolistica tensorilor, operații diferențiale invariante, reprezentări, coordonate ciclice.

În capitolul al șaselea, consacrat studiului elasticității cristalelor, sînt prezentate noțiunile de bază din acest domeniu (tensorul deformărilor mici, tensorul rotațiilor mici, tensorul tensiunilor), legea generalizată a lui Hooke, simetria proprietăților elastice ale cristalelor, deformări statice (după o direcție, forfecarea, încovoierea, torsionarea), tensiunile termice și undele elastice. În această ultimă parte a secțiunii sînt discutate o serie de fenomene interesante, cum ar fi refracția conică în acustică precum și unele noțiuni introduse mai recent: a) suprafața de refracție (F. I. Fiodorov, 1965), b) existența a cinci tipuri de unde și nu trei tipuri (două transversale și una longitudinală) așa cum era bine stabilit.

Obiectul capitolului al șaptelea îl constituie studiul energiei interne și al potențialului termodinamic al cristalelor și matricea lui, care are ca elemente derivatele de ordinul al doilea (coeficienți cunoscuți: capacitatea calorică, componentele tensorului permiti-

vității dielectrice, coeficienții elastici, coeficienții piroelectrici etc., cu excepția coeficienților legați de proprietățile magnetice). Coeficienții magnetici sînt analizați separat în capitolul următor. În acest capitol mai sînt descrise și unele efecte speciale: efectele electrocaloric și piezocaloric. Cea mai însemnată parte a acestui capitol este destinată analizei efectului piezoelectric: legătura dintre clasele cristaline și clasele piezoelectrice (modificarea tensorului Christoffel și deci și a vitezelor de propagare). Tot în acest capitol sînt analizate și unele aspecte ale tranzițiilor de fază: schimbarea simetriei cristaline în tranzițiile de fază de speța a doua (ca exemplu este prezentat pe larg titanatul de bariu), modificările proprietăților fizice în urma acestor tranziții (căldura specifică, coeficientul de dilatare, coeficienții piroelectrici și piezoelectrici, permitivitatea dielectrică etc.).

Simetria magnetică este analizată separat, în capitolul al optulea. Problemele principale abordate sînt următoarele: inversia temporală și antisimetria, grupurile spațiale ale simetriei magnetice (grupuri Șubnikov), efectele piezomagnetic și magnetoelastic, existența unor efecte speciale (piromagnetic, piezomagnetic, magnetocaloric, efectul magnetoelastic direct și invers).

Capitolul al nouălea este consacrat efectelor de ordin superior, efecte neliniare, care pot fi studiate prin considerarea termenilor de gradul al treilea din dezvoltarea potențialului termodinamic. Astfel de efecte sînt electrostricțiunea, efectul piezoelectric pătratic, efectul piezorezistiv, pus în evidență pe unele metale și semiconductori, efectele termogalvanomagnetice (efectul Hall, efectul Righi-Leduc, efectul Nernst-Ettingshausen), efectele electrooptice și piezooptice. Alte probleme specifice opticii cristalelor sînt legate de anizotropia optică artificială a cristalelor (modificarea indicatricei sub efectul acțiunilor externe — cristale uniace și biace artificiale, polarizarea neliniară, care apare în condițiile propagării undelor electromagnetice intense, generate de laseri de mare putere), activitatea optică a cristalelor, manifestată prin dispersie, dubla refracție, polarizarea eliptică ș.a. Trebuie neapărat menționate efectele neliniare acustice, care sînt analogul celor optice, cum sînt rotirea planului de polarizare, polarizarea undelor elastice prin propagarea în medii piezoelectrice etc.

În ultimul capitol, al zecelea, sînt schițate unele probleme generale ale fizicii cristalelor: sarcinile fizicii experimentale a cristalelor (stabilirea de corelații între distribuția parametrilor cristalelor și condițiile de preparare), probleme teoretice cu caracter aparent abstract (compararea proprietăților tensoriale ale cristalelor, alegerea sistemelor de coordonate cristalografice și cristalofizice), divergențe în problema standardizării notațiilor,

în care autorii arată că standardele din 1949 (*IRE Standards*) prezintă unele nepotriviri față de descoperirile ulterioare.

Cartea se încheie cu câteva anexe referitoare la sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice, la raportul dintre rețelele Bravais și matricele cristalografice, la proprietățile direcționale ale cristalelor, la operațiile de simetrie, la probleme de invarianță a tensorilor, la tipuri de tensori de material și la forma contrasă de scriere, totul terminându-se prin uzuala listă de notații folosite.

Constatind această eflorescență de informații nu se poate neglija efortul traducătorului în alegerea unor termeni în limba română, pentru care există încă suficiente controverse, sau reconvertirea unor nume de autori care nu sînt citați în original, ceea ce a necesitat o intensă muncă de documentare. Vom menționa în acest sens noțiunea de feroelectricitate (și implicit numele de sare Rochelle). În literatura sovietică și în cea de limbă germană noțiunea are ca punct de plecare sarea Seignette și de aici termenii de „seignettoelectricitate” și „antiseignettoelectricitate”, în timp ce în literatura de limbă engleză acești termeni descriu structuri ordonate, sub denumirea de „feroelectricitate” și „antiferoelectricitate”. Este sigur însă că nu aceste controverse vor pune probleme cititorilor interesați, ci răbdarea lor în a parcurge o carte cu adevărat utilă în profesiunea lor actuală și viitoare, indiferent de înclinarea personală spre știința aplicativă sau cea fundamentală a fizicii cristalelor.

Lector dr. I. Bunget

În ultimii 15 — 20 de ani fizica experimentală a cristalelor, depășind cadrul academic al unui număr restrîns de laboratoare de cercetări, a pășit în domeniul vast al practicii. Au apărut științe și tehnici noi, care se dezvoltă impetuos, așa cum sînt electronica cuantică, optica cuantică și optica neliniară, construcția de dispozitive cu semiconductori, tehnica piezoelectrică, acustica și altele; toate acestea sînt legate de utilizarea monocristalelor și a proprietăților lor deosebite și originale precum și de aplicațiile unor noi fenomene din fizica cristalelor, ale căror descoperiri se succed în prezent în lanț. Aceste fapte au generat necesitatea unor noi cărți de fizică a cristalelor. Nu este întîmplător succesul în țara noastră a manualului lui Nye (1967), a cărui versiune în limba rusă a reușit să apară, în scurt timp, în două ediții. Este totuși nevoie, pe lângă cartea lui Nye, desigur, și de o lucrare mai completă și mai detaliată, chiar dacă ar fi mai puțin utilă acelor care abordează pentru prima dată această disciplină.

După părerea autorilor, această monografie trebuie să joace tocmai un asemenea rol. La elaborarea ei autorii s-au străduit să îmbine tratarea fizică cu cea bazată pe teoria simetriei, care este proprie școlii sovietice de fizica cristalelor, fundamentată de A. V. Șubnikov. Autorii și-au dat toată silința, pe măsura capacității lor, să aplice și să dezvolte ideile lui A. V. Șubnikov de-a lungul întregii cărți.

Această carte a fost elaborată pe baza cursurilor și seminariilor de cristalografie și fizică a cristalelor, ținute de autori la Institutul oțelului și aliajelor din Moscova și la Facultatea de fizică a Universității de stat din Moscova; ea a fost concepută, în primul rînd ca manual. Anumite particularități, specifice unui manual, în primul rînd tratarea amănunțită și o anumită redare elementară, au fost păstrate și în forma finală. Din această cauză nu există o listă completă a bibliografiei; autorii nu au încercat să dea o listă exhaustivă a publicațiilor referitoare la diferite capitole ale fizicii cristalelor, ci au menționat doar anumite articole, caracteristice pentru aceste capitole, cît și cărțile care permit inițierea în respectivul capitol, considerat de-sine-stătător.

Intenționat nu sînt incluse în monografie cristalografia structurală și cristalochimia, proprietățile structural-sensitive, defectele și creșterea cristalelor. De asemenea, atît volumul cărții cît și stilul expunerii nu au permis să fie incluse descrierea metodelor de măsurare și exemplele de aplicare practică ale proprietăților fizice descrise ale cristalelor. Apariția relativ recentă a unei culegeri de probleme de fizica cristalelor, sub redacția unuia dintre autori (Perelomova și Taghiev, 1972), a permis ca problemele să nu fie incluse în lucrare.

Dintre principiile cristalografiei geometrice au fost expuse numai capitolele necesare pentru fizica cristalelor; s-au avut în vedere aici cunoscutele prelegeri ale academicianului N. V. Belov (1957, 1968), relative la cursul de cristalografie pentru fizicieni.

Din bogatul material al calculului tensorial au fost alese, de asemenea, numai acele probleme care sînt importante pentru fizica cristalelor; unele dintre ele aproape că nu sînt tratate în literatura științifică existentă. Împreună cu scrierea prin coordonate (indexată) a relațiilor tensoriale, în lucrare este utilizată și scrierea fără indici, ceea ce permite cititorului să evalueze singur care dintre ele este mai potrivită în fiecare caz concret în parte. Notățiile utilizate de diferiți autori în scrierea fără indici gravitează în jurul a două tipuri: unul dintre ele este folosit, de exemplu, în monografiile lui F. I. Fiodorov (1958, 1965), iar celălalt, inițiat încă de Gibbs, este utilizat în cursul lui Borisenko și Tarapov (1966) și în monografiile lui Lure (1955, 1970). Aici sînt folosite notațiile de tipul al doilea, ele fiind potrivite nu numai pentru tensorii de rangul doi, ci și pentru tensorii de rang mai înalt. În carte nu este tratată teoria grupurilor, deoarece ea se aplică numai în cîteva cazuri în care evitarea acestei teorii a fost imposibilă.

În expunerea fizicii cristalelor se subliniază influența simetriei și disimetriei cristalelor asupra proprietăților lor fizice fundamentale și în special asupra anizotropiei acestor proprietăți. Trebuie ținut cont că din acest punct de vedere apar analoage proprietăți care, în alte privințe, sînt complet deosebite (de exemplu, difuzia și permitivitatea, magnetostricțiunea și efectul piezooptic). Descrierea anizotropiei uneia dintre proprietăți este aplicabilă în mare măsură și altei proprietăți, cel puțin calitativ. În ceea ce privește însă caracteristicile cantitative ale anizotropiei, acestea diferă mult, atît de la o proprietate la alta, cît și de la o substanță la alta. Datele corespunzătoare pot fi găsite în unele îndreptare, ca de exemplu Landolt-Boernstein (1966, 1969, 1971), Krishnan (1958), Voronkova, Grecușnikov, Distler, Petrov (1965), și în articolele de sinteză, după care au fost întocmite tabelele ilustrative ale constantelor de material ale cristalelor, incluse în

această lucrare, care permit cititorului să-și dea seama de mărimea efectului și de anizotropia lui.

Pentru o prezentare mai intuitivă a anizotropiei proprietăților fizice ale cristalelor, în carte sînt cuprinse desenele explicative: suprafețele tensorilor, secțiunile și proiecțiile lor stereografice. Unele dintre ele sînt luate din literatură, iar altele sînt calculate și realizate sub conducerea unuia dintre autorii Ș. M. Butabaev și L. G. Ianusova cu sprijinul lui P. L. Rubin (lui Ș. M. Butabaev îi aparțin figurile 24.2, 24.11, 47.5, a, 54.3, 54.10, 58.2, 58.3, 81.2, iar lui L. G. Ianusova figurile 44.1, 47.2, 47.3, 47.4, 47.5, b, 47.6, 54.4, 54.5, 54.6, 54.8, 56.4). Autorii le exprimă sincere mulțumiri pentru volumul mare de muncă și deloc ușoară, care a contribuit atît de mult la îmbunătățirea acestei cărți.

Pentru demonstrarea anizotropiei proprietăților fizice ale cristalelor, ca exemplu de referință au fost alese proprietățile elastice, în virtutea faptului că ele sînt relativ simple și bine studiate. În practica teoriei elasticității s-a luat drept caracteristică principală a deformării nu vectorul deplasare, ci tensorul deformării; aceasta permite să se scurteze expunerea și să se scoată în evidență analogia dintre ecuațiile fundamentale ale electrostaticii și cele ale elastostaticii.

Optica cristalelor este redată pe scurt și în cea mai mare parte clasic. Tot pe scurt este expusă și acustica cristalelor, cu atît mai mult cu cît ei îi sînt consacrate două monografii excelente (F.I. Fiodorov, 1965; Musgrave, 1970). Simetria și topologia suprafețelor de undă este ilustrată folosind materialul grafic selecționat din periodicele științifice.

În prima jumătate a capitolului 7 este examinat, din punct de vedere termodinamic, sistemul legăturilor dintre fenomenele termice, electrice și elastice din cristale, piezoelectricitatea fiind considerată drept cea mai importantă manifestare a acestor legături. Cea de a doua jumătate a acestui capitol este consacrată aspectelor de simetrie a teoriei lui L. D. Landau a tranzițiilor de fază de speța a doua. Nouă din punct de vedere metodic este descrierea unitară a tuturor tranzițiilor de fază posibile, cu dubla schimbare a simetriei (§ 65), care arată că în limitele de aplicabilitate a teoriei, toate modificările proprietăților cristalului în cadrul tranziției de fază sînt determinate de grupurile de simetrie de fază, legate între ele prin această tranziție de fază. În § 66 se examinează variațiile posibile ale simetriei cristalului în cadrul tranziției (de fază); odată cu prezentarea lucrărilor clasice, aici sînt sintetizate și unele lucrări recente.

Capitolul 8, nu prea întins, este consacrat aplicației antisimetriei și simetriei magnetice în fizica cristalelor. Proprietățile mag-

netice ale cristalelor sînt analizate aici numai în măsura în care ele apar ca o manifestare a simetriei magnetice specifice.

În capitolul 9 este examinată succint o întreagă gamă de diferite efecte de ordin superior: mai întîi cele legate de luarea în considerare a termenilor de ordin superior din ecuațiile de material (elasticitatea neliniară, efectul piezorezistiv, efectul termogalvanomagnetic, efectul piezoelectric, efectul electrooptic, susceptibilitatea dielectrică neliniară), iar după aceasta, cele datorate dispersiei spațiale (activitatea optică și activitatea acustică). În măsura în care este necesar se utilizează și aici simetria magnetică (§ 76, § 82).

Rezolvarea unor probleme generale ale fizicii cristalelor, care constituie conținutul capitolului 10, este necesară pentru utilizarea în practică a oricăreia dintre proprietățile fizice anizotrope ale cristalelor.

În anexe este cuprins mai ales materialul informativ care se referă simultan la mai multe secțiuni ale cărții.

Autorii au elaborat împreună planul și au analizat conținutul tuturor secțiunilor cărții, încît în multe locuri devine dificilă delimitarea aportului fiecăruia dintre ei. Capitolele 1, 3 și 4 au fost scrise cu precădere de M. P. Șaskolskaia, iar restul mai ales de către I. I. Sirotin.

Autorii aduc mulțumiri lui S. A. Ahmanov, L. K. Zarembo, V. A. Koptîk, V. K. Semencenko, M. M. Umanski, cu care au discutat fiecare secțiune a cărții; aduc, de asemenea, mulțumiri lui V. A. Frank-Kamenetki, V. A. Bokov și V. N. Rojanski, care și-au asumat munca de recenzare a cărții. Autorii mulțumesc foștilor lor studenți, E. Bartenev, N. Voropaev, S. Orlov, G. Titov și V. Șcerbakov, care le-au pus la dispoziție conspectele lor, efectuînd și unele calcule. Observațiile asupra cărții, indicarea neajunsurilor și greșelilor vor fi primite de autori cu recunoștință.

I. I. Sirotin, M. P. Șaskolskaia

CAPITOLUL 1

NOȚIUNI FUNDAMENTALE DIN CRISTALOGRAFIE

§ 1. STRUCTURA CRISTALULUI ȘI REȚEAUA SPAȚIALĂ

„Cristalografia este o ramură a științei care are ca scop descrierea și interpretarea structurii și a proprietăților stărilor condensate ale substanței și a legăturii acestora cu conexiunile spațiale ale atomilor și ale forțelor dintre atomi” (Crystallographic Book List, 1965)*.

Conexiunile spațiale ale atomilor și ale forțelor dintre atomi caracterizează gradul de perfecțiune, ordinea și simetria structurii interne a cristalului. Particulele din care sînt formate cristalele (adică atomii, ionii, moleculele, complecșii) sînt dispuse ordonat și simetric în spațiu în șiruri plane, în rețele. Ca urmare a ordinii

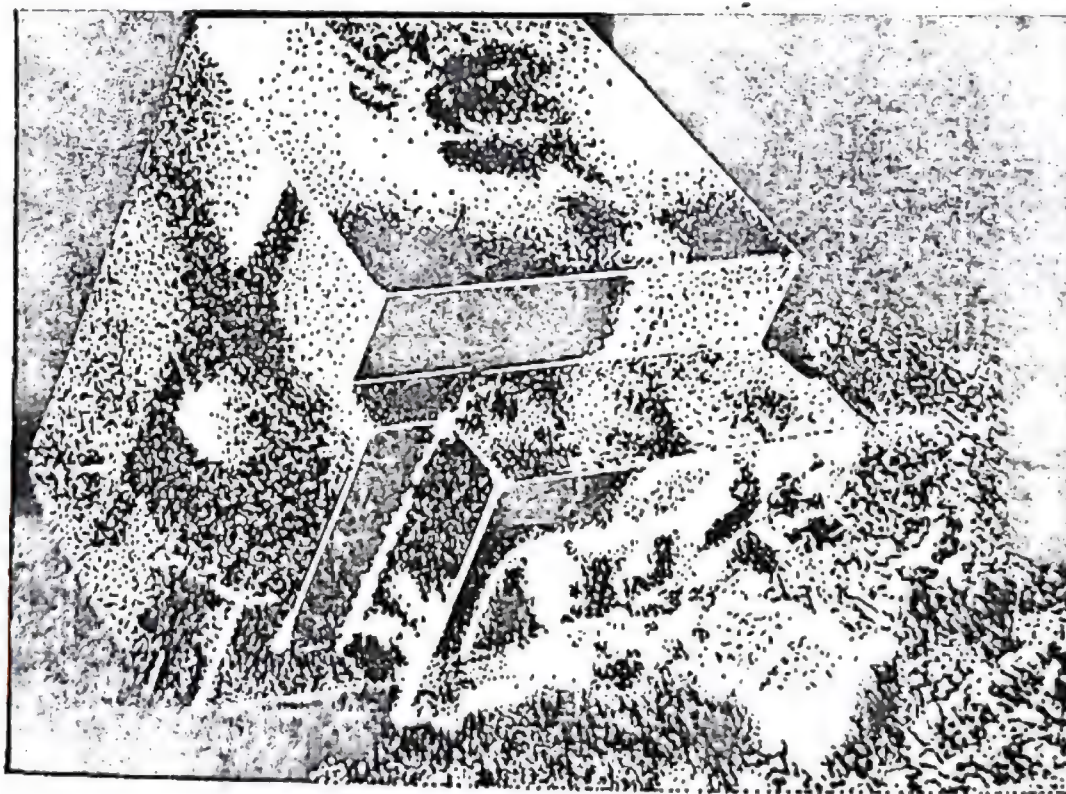


Fig. 1.1. Poliedru natural de sare gemă.

și simetriei structurii interne, sînt simetrice și proprietățile fizice ale cristalelor, sînt simetrice și formele lor poliedrice exterioare (fig. 1.1).

* Bibliografia se află la sfîrșitul cărții, p. 752.

Ordinea și simetria structurii unui cristal sînt consecințe ale echilibrului dinamic al unui mare număr de forțe și de procese. Acțiunile exterioare, cum ar fi, de pildă, cîmpul electric sau cîmpul magnetic, solicitarea mecanică sau adaosul de atomi străini în cristal, pot perturba întrucitva acest echilibru dinamic; în consecință, se modifică corespunzător și proprietățile cristalului. Acest fapt permite o gamă largă de posibilități de a modifica după dorință proprietățile cristalelor utilizate în tehnică.

Consecințele ordinii și simetriei structurii sînt omogenitatea, discontinuitatea și anizotropia cristalelor.

În general, punctele dintr-un cristal sînt diferite: într-un punct se află o particulă de un anumit fel (să zicem, un nucleu de Na), în altul, o particulă de alt fel (nucleu de Cl), într-un al treilea punct, în general nu există nici un nucleu, însă el este caracterizat de o anumită valoare, bine determinată, a potențialului electric, într-un al patrulea punct există o altă valoare a potențialului electric și așa mai departe (fig. 1.2).

Cu toate acestea, cristalul considerat ca întreg este omogen; orice parte a lui nu este cu nimic nici mai bună, nici mai rea decît o altă parte a sa*. Omogenitatea cristalului se definește prin existența așa-numitei *raze de omogenitate*, R : oricum s-ar lua într-un cristal o sferă de rază R , pe această sferă, pentru fiecare punct, există un alt punct la fel dispus (sau, după cum se obișnuiește să se spună, punctul *omolog* primului punct), adică într-o sferă de omogenitate există cel puțin două nuclee de Na, două nuclee de Cl etc. Așa cum rezultă din analiza röntgenografică, raza de omogenitate este de cîtiva angströmi. În același timp, cristalul este o structură discretă; fiecare punct din cristal poate fi înconjurat cu o sferă de discontinuitate care să aibă o rază atît de mică, încît în interiorul ei să nu mai existe nici un punct omolog cu ele. Pentru puncte diferite ale cristalului razele de discontinuitate sînt diferite, toate fiind însă, în orice caz, mai mici decît raza de omogenitate (fig. 1.3).

Vom remarca de la bun început că există o abordare duală a prezentării substanței cristaline: cristalele pot fi considerate atît medii discrete (adică discontinue), cît și medii continue (adică neîntrerupte). Faptul că structura internă este discretă înseamnă, firește, că proprietățile cristalului în locurile în care există particule nu pot fi identice cu aceleași proprietăți în locurile în care acestea nu există, sau în locurile în care se află particule de diferite tipuri. Dealtfel, pentru descrierea multor proprietăți ale crista-

* Alci și în continuare nu avem în vedere defectele structurii cristalului, adică este vorba numai despre cristalul ideal. În orice cristal real există defecte ale structurii, legate de condițiile de creștere și de istoria cristalului, adică de tratamentele mecanice, termice etc., la care a fost supus.

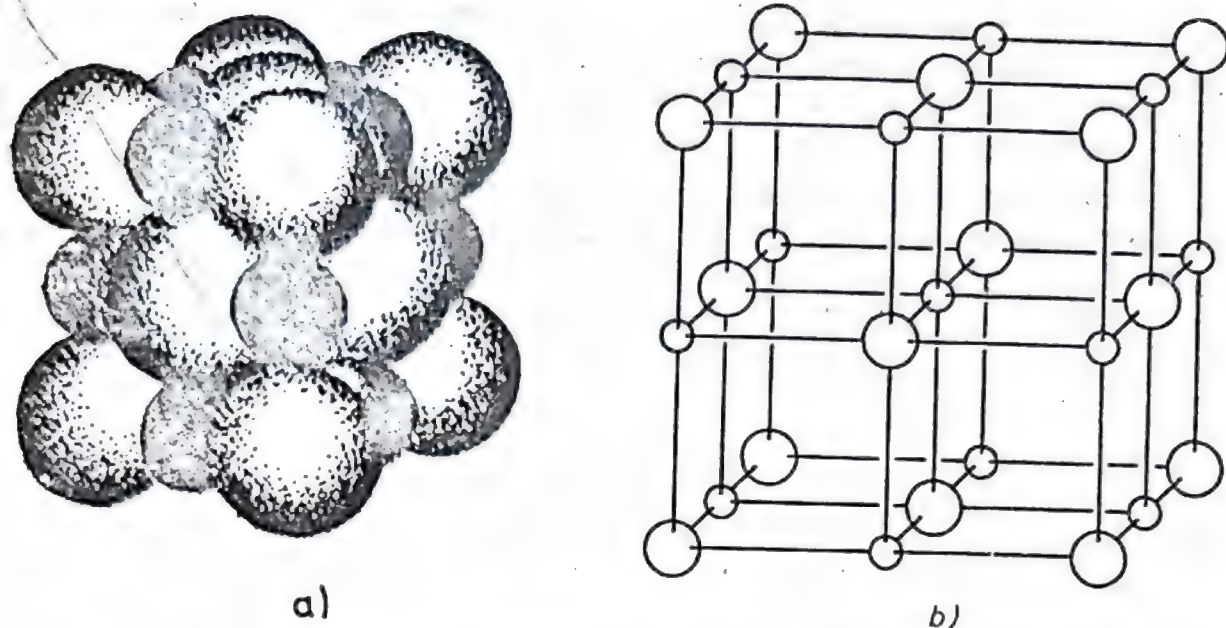


Fig. 1.2. Structura sării geme (clorură de sodiu) : model (a) și schemă (b)

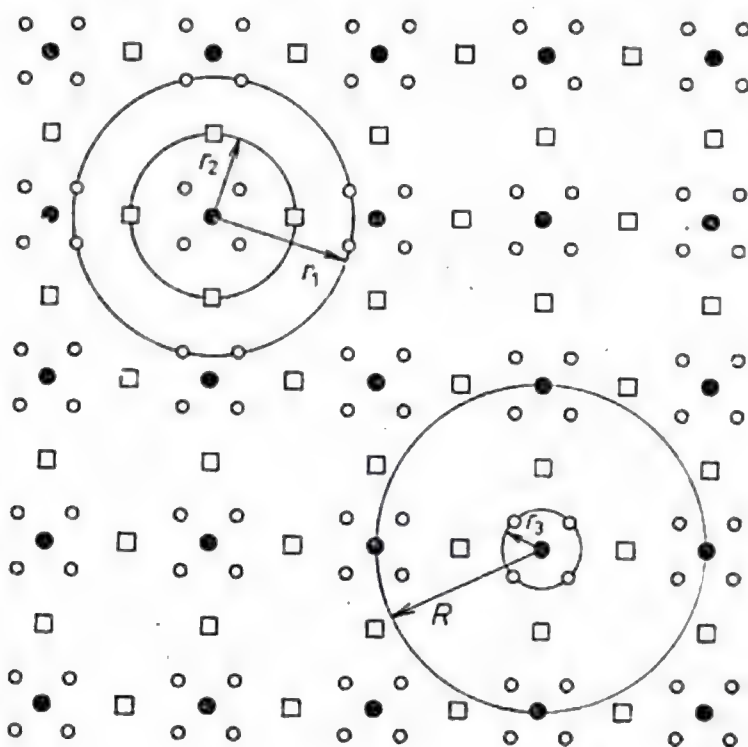


Fig. 1.3. Raza de omogenitate, R , a unui spațiu cristalin și razele de discontinuitate, r_1 , r_2 , r_3 , ale diferitelor sale puncte.

lului este suficient să ne limităm la examinarea unor volume mult mai mari decât volumul propriu al particulei și mult mai mici decât volumul cristalului în întregime. Tocmai în acest sens vom considera cristalul ca pe un mediu continuu și omogen.

Anizotropia este însușirea care constă în faptul că aceleași proprietăți se manifestă deosebit pe direcții diferite. Din cauza faptului că în structura cristalului distanțele dintre particule și forțele dintre particule sînt diferite după direcții diferite, aproape

toate proprietățile cristalului sînt deosebite în direcții diferite (fiind însă aceleași în direcții simetrice). Și viteza de creștere a cristalului este anizotropă: tocmai din această cauză cristalul crește sub formă de poliedru regulat simetric.

Cînd crește un cristal, particulele materiale din mediul înconjurător se depun pe fețele cristalului, astfel încît fețele cresc paralel cu ele însele. Se modifică aria fețelor, forma lor, fețe separate pot să se deplaseze peste cele vecine și să le acopere, dar unghiul dintre fețe rămîne neschimbat. De aceea, fiecare substanță cristalină poate fi caracterizată univoc prin unghiul dintre fețele lui.

În toate cristalele unei anumite substanțe, în aceleași condiții, unghiurile dintre fețele corespunzătoare ale cristalelor sînt constante (în cazul în care substanța există sub forma a cîtorva modificări polimorfe, totdeauna este vorba de o anumită modificare polimorfă). În aceasta constă *legea constanței unghiurilor cristalelor*, stabilită de Nikolai Stenon în anul 1669, pe baza observațiilor asupra cristalelor poliedrice naturale (Stenon, 1958).

Legea constanței unghiurilor se poate explica prin faptul că fețele unui poliedru cristalin corespund unor rețele plane atomice din structura cristalului. Unghiurile dintre rețelele plane constituie o particularitate distinctivă a structurii unei anumite substanțe cristaline, particularitate ce depinde de forțele de legătură dintre particulele care constituie cristalul. Astăzi, aceste unghiuri se măsoară și se determină cu ajutorul röntgenogramelor, indiferent dacă cristalul are sau nu o formă exterioară regulată.

În procesul de creștere a unui cristal particulele se aranjează în șiruri și rețele ordonate și simetrice. Fețele poliedrelor cristaline corespund planurilor compuse din particulele materiale, iar muchiile cristalului, șirurilor acestor particule materiale. Centrele de masă ale particulelor formează șiruri, rețele plane, rețele cristaline.

În structura unui cristal ideal toate punctele omoloage (dispuse la fel) sînt plasate în șiruri ordonate, simetrice, infinite (fig. 1.4). Punctele spațiului cristalin sînt anizotrope; de aceea, este mai bine să le reprezentăm sub formă de figuri mici, asimetrice, cu toate că, în majoritatea cazurilor, le vom reprezenta, de dragul simplificării, prin puncte sau mici sfere. Distanța cea mai mică dintre punctele omoloage, dintr-un șir infinit, se numește *translația cea mai scurtă*, sau *translația fundamentală*, a , sau *perioada translației*, *perioada de identitate a șirului*, *parametrul șirului*. În structura cristalului, aceasta este distanța dintre atomi.

Șirurile, rețelele plane și rețelele cristaline sînt considerate infinite. În majoritatea corpurilor cristaline distanța dintre atomi



Fig. 1.4. Șir simetric, infinit.

este de $3-5 \text{ \AA}$; din această cauză, într-un volum de numai 1 mm^3 se află aproximativ 10^{21} particule, ceea ce, practic, poate fi considerat, fără discuție, un număr infinit.

Transformarea simetrică, cu ajutorul căreia un punct, fără a se roti, se repetă în spațiu, adică deplasarea, transpunerea paralelă, se numește *transformare cu ajutorul translației*, sau, simplu, *translație* (termenul de translație are două sensuri: 1) transformarea simetrică, ce reprezintă o deplasare paralelă, infinită, pe o anumită distanță; 2) distanța cea mai mică din șirul punctelor omoloage). Repetind cu ajutorul translației un punct oarecare, obținem un șir periodic infinit de puncte omoloage, la distanțele $-a, \dots, a, 2a, 3a, \dots, na, \dots$. Caracteristica acestui șir este translația a . Punctele omoloage, legate între ei printr-o transformare simetrică cu ajutorul translației a , se numesc *nodurile* șirului. Notăm aici că un nod al șirului, ca și, în continuare, un nod al rețelei plane sau al rețelei spațiale, nu trebuie să coincidă neapărat cu o particulă materială.

Repetind punctele unui șir simetric cu ajutorul unei alte translații, a_2 , neparalelă cu prima, obținem un sistem de puncte omoloage sub formă de *rețea plană* (fig. 1.5). O rețea plană poate fi definită complet cu ajutorul a două translații, a_1 și a_2 , sau, de asemenea, cu ajutorul a trei noduri arbitrare, care nu se află pe aceeași dreaptă. Paralelogramele ale căror vîrfuri sînt noduri se numesc *celule* ale rețelei plane. Orice pereche de translații, care nu se află pe o aceeași dreaptă, va repeta punctele omoloage sub forma unei rețele plane; drept parametri fundamentali ai unei rețele plane au fost însă adoptate, prin convenție, așa-numitele *translații elementare* — cele mai scurte translații, care reflectă

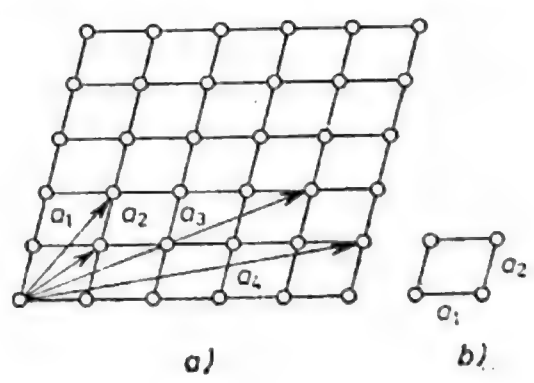


Fig. 1.5. Rețeaua plană simetrică infinită: a) posibilitatea alegerii diferite a translațiilor elementare, a_1, a_2, \dots, a_n ; b) celulă primitivă, construită din cele mai mici translații și simetria corespunzătoare rețelei.

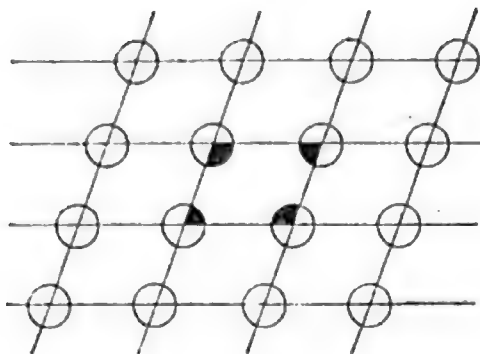


Fig. 1.6. Nodul din vârful unei celule aparține concomitent celor patru celule. Partea ce revine unei singure celule este cea înegrită.

simetria rețelei. O pereche de translații elementare, a_1 și a_2 , definește complet schema de repetare a punctelor omoloage dintr-un plan.

Celula ale cărei laturi sînt translații elementare se numește *celulă elementară* a rețelei plane. O celulă elementară este *primitivă*, dacă în interiorul ei nu există noduri. Suprafața celulei elementare este egală cu suprafața care revine fiecărui nod al rețelei, adică pentru o anumită rețea această mărime este constantă. De fapt, în fiecare vîrf al unei celule primitive există cîte un nod, dar acest vîrf este concomitent vîrfurile a patru celule vecine, ceea ce înseamnă că nodul aparține concomitent celor patru celule, adică fiecărei celule date, fiecărui vîrf al ei îi revin numai $1/4$ dintr-un nod, iar în total, unei singure celule primitive îi revine $4 \cdot \frac{1}{4} = 1$ nod

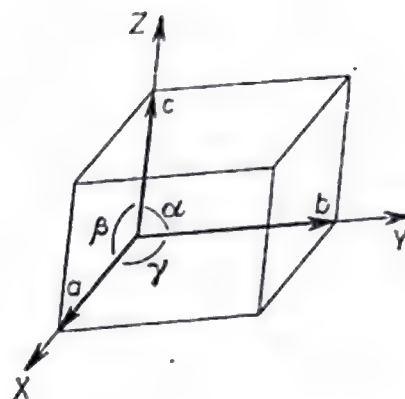
(fig. 1.6). Oricum am lua celula elementară primitivă, numărul nodurilor pe unitatea de suprafață, sau așa-numita *densitate reticulară* a rețelei, va rămîne același. Această mărime este constantă pentru o anumită rețea plană. În timpul creșterii cristalului se formează preferențial fețele cu o densitate reticulară mai mare.

Celulele elementare ale rețelei plane se lipesc una de alta, completînd perfect planul (fără spații goale), la infinit. Repetînd deplasările unei celule elementare paralel cu ea însăși, adică transformînd-o simetric cu ajutorul unei perechi de translații elementare, obținem întreaga rețea plană infinită.

Să adăugăm unei perechi de translații elementare o a treia translație, necoplanară cu primele două. Prin deplasarea la infinit a unui nod cu ajutorul a trei translații necoplanare vom obține o *rețea spațială*, adică un sistem simetric, tridimensional de puncte omoloage. Cele trei translații fundamentale, a_1 , a_2 , a_3 , ale rețelei spațiale pot fi luate în diferite moduri, dar, ca și în cazul rețelei plane, de obicei se aleg translațiile cele mai mici, care reflectă cel mai bine simetria rețelei.

Paralelipipedul ale cărui laturi sînt cele trei translații elementare se numește *celulă elementară* sau *paralelipiped elementar*. Un paralelipiped elementar este considerat paralelipiped primitiv, dacă în interiorul lui nu există noduri.

Fig. 1.7. Paralelipipedul elementar (notațiile standard).



De regulă, lungimile translațiilor elementare, adică muchiile celulei elementare, se notează cu literele a , b , c , sau a_1 , a_2 , a_3 , iar unghiurile dintre ele cu α , β , γ (fig. 1.7).

Grupul translațiilor celulei elementare cuprinde cele trei translații elementare, a_1 , a_2 , a_3 , care corespund celor trei muchii ale celulei și care definesc complet rețeaua*.

Dacă sînt cunoscute cele trei translații fundamentale, a_1 , a_2 , a_3 , atunci poziția oricărui nod al rețelei se determină cu ajutorul vectorului.

$$R = ma_1 + na_2 + pa_3, \quad (1.1)$$

unde m , n , p sînt numere întregi, iar vectorii a_1 , a_2 , a_3 definesc baza vectorială a rețelei.

Cele trei numere, m , n , p , închise între paranteze pătrate duble, $[[mnp]]$, poartă numele de *simbolul nodului*.

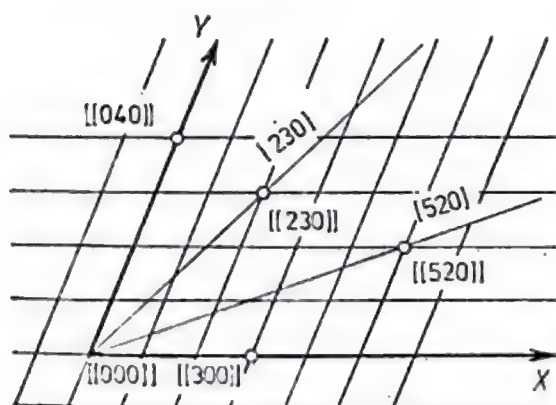


Fig. 1.8. Simboluri ale nodurilor și ale șirurilor.

* În cele ce urmează (§ 9) se va arăta că uneori este mai comod să se caracterizeze rețeaua nu prin intermediul celulei primitive, ci prin intermediul *celulei complexe*, care are noduri nu numai în virfuri, ci și în centrul celulei sau în centrele fețelor. În acest caz și grupul translațiilor se complică în mod corespunzător.

Direcția cristalografică este direcția drepte care trece prin cel puțin două noduri ale rețelei. Pe o astfel de dreaptă se va afla, evident, o mulțime infinită de noduri ale rețelei. Unul dintre aceste noduri poate fi luat drept origine a axelor de coordonate, $[[000]]$. Direcția cristalografică (șirul rețelei) va fi complet determinată de nodul cel mai apropiat de originea axelor de coordonate, care se află pe aceea direcție.

Spre deosebire de simbolul nodurilor, $[[mnp]]$, simbolul direcției (șirul rețelei) se scrie între paranteze pătrate obișnuite, $[mnp]$ (fig. 1.8). Numerele m, n, p se numesc în acest caz *indicii Miller* ai direcției cristalografice date și ai tuturor direcțiilor paralele cu aceasta. Cei trei indici, scriși între paranteze pătrate, se numesc *simbolul Miller pentru șir*. Indicii Miller se scriu unul după altul, fără virgulă, citindu-se separat, ca cifre (de exemplu, simbolul Miller $[102]$ se citește : unu, zero, doi).

Direcțiile axelor de coordonate au următorii indici Miller : axa $X - [100]$, axa $Y - [010]$, axa $Z - [001]$, indiferent de unghiurile dintre axele de coordonate.

Volumul unei celule elementare primitive este egal cu volumul unui singur nod : fiecare nod din vârful unui paralelipiped elementar aparține celor opt paralelipiede vecine, adică în total, unui paralelipiped îi revine $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ nod. Paralelipiede elementare

sînt perfect lipite unul de altul. Întreaga rețea poate fi obținută repetind la infinit în spațiu paralelipipedul elementar cu ajutorul celor trei translații fundamentale.

Mărimile $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$, sau parametrii cristalului (*metrica cristalului*) sînt constante de material ale fiecărei substanțe cristaline. În cazul general, în cristale, $a \neq b \neq c$ și $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$, adică translațiile fundamentale nu sînt egale și nici ortogonale. Toate sistemele de coordonate, care sînt utilizate în cristalografie, sînt enumerate în continuare, în § 4, tabelul 4.1.

Rețelele spațiale constituie baza naturală a sistemelor de coordonate cristalografice. Drept origine a axelor de coordonate se ia unul dintre nodurile rețelei, iar cele trei translații elementare, care se intersectează în acest nod, sînt considerate ca vectori, a_1, a_2, a_3 , avînd originea în originea axelor de coordonate. Acești vectori — denumiți *vectori covarianți ai bazei* — sînt evident necoplanari ; în caz contrar, volumul celulei elementare ar fi egal cu zero. Anume ei sînt cei ce determină sistemul cristalografic de coordonate : direcțiile lor coincid cu axele sistemului de coordonate, $X(a_1), Y(a_2), Z(a_3)$, iar lungimile lor reprezintă unitățile de măsură naturale după axele respective. Vectorii a_1, a_2, a_3 formează un triplet drept. În mod corespunzător, sistemul cristalografic de axe de coordonate, XYZ , va fi totdeauna un sistem rectiliniu,

drept, însă în general oblic, avind unități de măsură diferite (incomensurabile) pentru cele trei axe.

Rețeaua spațială este o construcție geometrică cu ajutorul căreia se pun în evidență, în spațiul cristalului, punctele omoloage. Cu alte cuvinte, rețeaua spațială este o schemă a periodicității tridimensionale a distribuției particulelor din structura cristalului. Încă o dată atragem atenția că un nod al rețelei nu trebuie să fie neapărat identificat cu o particulă materială. Rețeaua redă simetria structurii, independent de faptul că un nod coincide cu un atom de un tip sau de altul sau cu spațiul dintre atomi. În acest din urmă caz se vor repeta simetric în spațiu intervalele spațiale și atomii ce le înconjură.

Structura cristalului reprezintă o distribuție concretă a particulelor materiale în spațiu, reprezintă simetria, legile sau motivele acestei distribuții. Rețeaua spațială redă periodicitatea repetării în spațiu a diferitelor particule materiale sau a grupurilor de astfel de particule, sau a „locurilor goale” dintre aceste particule.

„Rețeaua reflectă dimensiunea și forma unității de structură care se repetă, adică celula sa elementară, fără a determina însă care este distribuția substanței în însuși interiorul celulei elementare. Într-o primă etapă acest fapt nici nu este important. Structura de rezistență (scheletul de oțel) al unui edificiu trebuie să existe înainte de a începe examinarea aranjării interioare sau a mobilării lui” (Lonsdale, 1952).

§ 2. PROIECȚIILE CRISTALOGRAFICE

Metoda proiecțiilor cristalografice se aplică pentru reprezentarea simetriei formelor exterioare și a structurii cristalelor, a anizotropiei și a simetriei proprietăților lor, pentru descifrarea röntgenogramelor. Conform legii constanței unghiurilor, atit forma unui poliedru cristalin, cît și simetria și anizotropia proprietăților lui pot fi caracterizate prin setul de unghiuri dintre fețele sale, sau, așa cum se obișnuiește în cristalografie, prin setul de unghiuri dintre normalele la fețe.

Să ne imaginăm o sferă care este circumscrisă cristalului. Din centru O al acesteia ducem normalele la fețele cristalului, prelungindu-le pînă ce intersectează sfera. Fiecare normală se va proiecta pe sferă ca un „punct polar” (punctul a_1 din figura 2.1, a). Orice plan care trece prin centrul O intersectează suprafața sferei după arce de cerc. Dacă planurile sau direcțiile pe care le proiectăm nu trec prin punctul O , ele pot fi deplasate paralel cu ele însele, fără a afecta relațiile unghiulare.

Poziția fiecărui punct pe sfera proiecțiilor este dată de două coordonate sferice: ρ — distanța polară, măsurată pentru orice azimut de la zero (polul nord, N) până la 180° (polul sud, S), și φ — longitudinea, măsurată pe ecuator, începînd de la meridianul considerat drept meridian zero (fig. 2.1, b). Proiecția sferică obți-

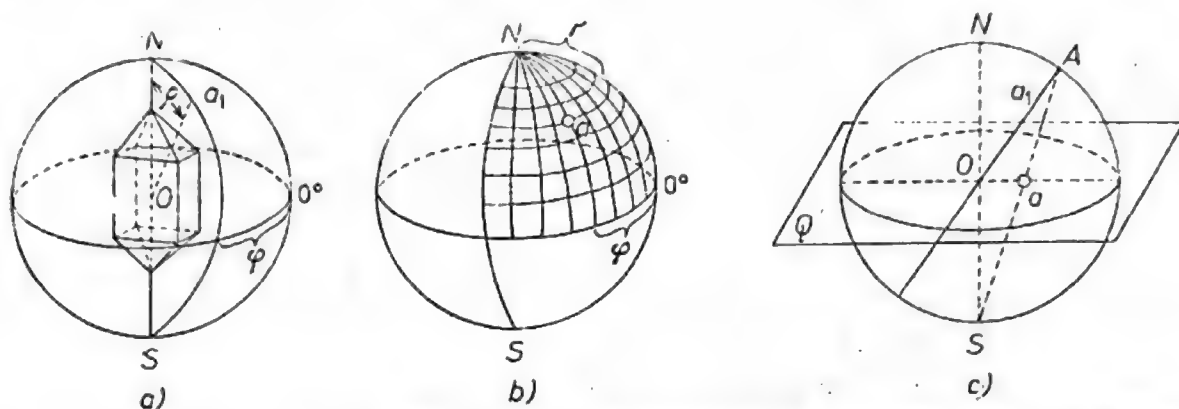


Fig. 2.1. Construirea proiecției sferice (a), măsurarea coordonatelor pe ea (b) și construirea proiecției stereografice (c).

nută se proiectează, la rîndul ei, în plan, sub formă de proiecție stereografică, proiecție gnomostereografică sau proiecție gnomonică (centrală).

Drept plan de proiecție pentru proiecția stereografică și pentru proiecția gnomostereografică se ia planul ecuatorial al sferei proiecțiilor, pe cînd planul proiecției gnomonice este planul tangent la polul nord al sferei proiecțiilor.

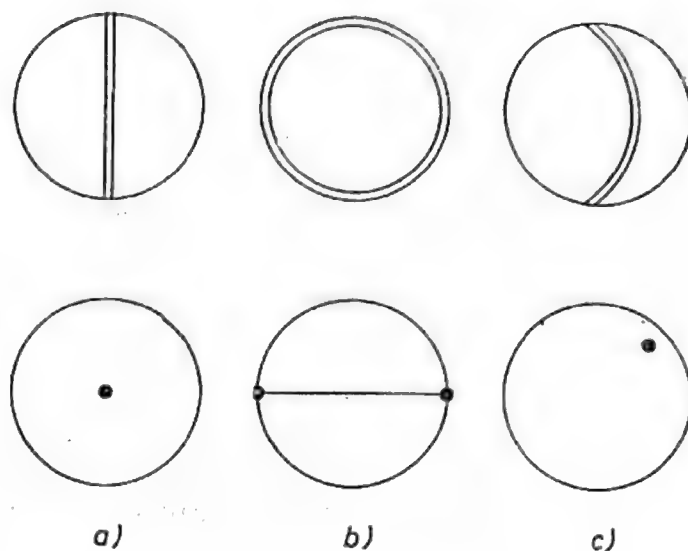
În proiecția stereografică direcțiile stereografice sînt reprezentate prin puncte, iar planurile prin arce de cercuri mari. În proiecția gnomostereografică lucrurile se petrec invers: planurile sînt reprezentate prin puncte, iar direcțiile prin arce de cercuri mari.

Proiecția stereografică se utilizează mai ales pentru reprezentarea elementelor de simetrie ale unui cristal. Ca plan al acestei proiecții servește planul ecuatorial, Q , al sferei proiecțiilor, pe care proiecția sferei este un cerc (fig. 2.1, c).

Pentru a proiecta o dreaptă, de pildă OA , se duce dreapta AS de la punctul polar A , de pe sfera proiecțiilor, pînă la polul sud, S , al sferei. Punctul a , de intersecție a liniei AS cu cercul proiecțiilor va fi proiecția stereografică a direcției OA . Proiecția stereografică a unei linii drepte este reprezentată printr-un punct în interiorul cercului proiecțiilor (fig. 2.2, a).

Direcțiile oblice, care au $0^\circ < \rho < 90^\circ$, se proiectează în interiorul cercului proiecțiilor, cu atît mai aproape de cerc, cu cît ρ este mai mare. Dacă $\rho > 90^\circ$ (însă $\rho < 270^\circ$), adică direcțiile ies prin emisfera inferioară a sferei proiecțiilor, atunci

Fig. 2.2. În rîndul de sus — proiecțiile stereografice ale unor planuri (sau proiecțiile gnomostereografice ale unor direcții); în rîndul de jos — proiecțiile stereografice ale unor direcții (sau proiecțiile gnomostereografice ale unor planuri); toate se află față de planul proiecției: normale (a), paralele (b), înclinate (c).



sensul de proiectare este invers, notîndu-se în proiecție nu cu cerceulețe, ci cu cruciulițe.

Un plan care trece prin punctul O (ce intersectează sfera după un cerc, fig. 2.1) se va proiecta, în proiecția stereografică, sub forma unui arc de cerc mare. Pentru a nu încărea desenul, de obicei se proiectează numai intersecția planurilor sau liniilor din semisfera superioară.

Proiecțiile stereografice ale planurilor orizontale coincid cu circumferințele cercului proiecțiilor (fig. 2.2, b), ale planurilor verticale, cu diametrele cercului proiecțiilor (fig. 2.2, a), iar ale planurilor înclinate, cu arcuri care se sprijină pe capetele diametrului (fig. 2.2, c). O linie verticală are drept proiecție centrul cercului proiecțiilor, iar o linie orizontală două ieșiri pe circumferința ecuatorului.

Un cerc trasat pe sferă se reprezintă în proiecția stereografică tot ca un cerc sau ca o linie dreaptă. În proiecția stereografică relațiile unghiulare nu sînt afectate, adică unghiul dintre polii fețelor de pe sferă (măsurat pe arcele cercurilor mari) este egal cu unghiul dintre proiecțiile stereografice ale aceluiași arce.

Proiecția gnomostereografică se utilizează în special pentru reprezentarea formelor cristalului, a fețelor și a muchiilor lui. Ea este reprezentată tot printr-un cerc în planul ecuatorial al sferei proiecțiilor.

Pentru a obține o proiecție gnomostereografică a unui plan cristalografic (a unei fețe), se duce normala la acest plan (față) pînă la intersecția cu sfera proiecțiilor, iar apoi dreapta care unește acest punct de intersecție cu polul sud al sferei (pentru normalele care intersectează sfera în semisfera inferioară — cu polul nord al sferei). Proiecția gnomostereografică a unui plan (față a cristalului) este un punct. Proiecțiile normalelor la fețele ce se află

plasate deasupra planului proiecției sînt notate cu cerceulețe, iar ale normalelor la cele de sub el, cu cruciulițe.

Fetele orizontale se proiectează în centrul cercului proiecțiilor (cea superioară — printr-un cerceuleț, cea inferioară — printr-o cruciuliță), fețele verticale se proiectează chiar pe cercul proiecțiilor, iar fețele înclinate, în interiorul cercului proiecțiilor (fig. 2.2). Cu cît este mai mare înclinația feței, cu atît punctul care reprezintă proiecția ei se află mai departe de centru. Proiecțiile fețelor ce aparțin unei zone se află pe același cerc mare al proiecțiilor.

Proiecțiile gnomostereografice ale direcțiilor (ale muchiilor cristalului) sînt reprezentate prin arce ale cercurilor mari. Cercul mare, adică cercul al cărui centru este centrul cercului proiecțiilor, este locul geometric al polilor tuturor fețelor ale căror normale se află în același plan (și anume, în planul cercului mare).

Adesea, proiecția stereografică și proiecția gnomostereografică se suprapun pe același desen.

Pentru rezolvarea problemelor cu ajutorul proiecțiilor stereografice sau al proiecțiilor gnomostereografice se utilizează rețele gradate. Cea mai des folosită este rețeaua lui Wulf — proiecția stereografică a întregului sistem de meridiane și de paralele de pe suprafața sferei, pe planul unuia dintre meridiane.

Rețeaua lui Wulf se desenează de obicei pe un cerc cu diametrul de 20 cm, iar liniile paralelelor și ale meridianelor, ale căror proiecții sînt arce de cerc, sînt trasate din două în două grade. Distanța dintre ele poate fi împărțită „din ochi” în încă patru părți, astfel încît se poate lucra cu o precizie de pînă la $0,5^\circ$ (fig. 2.3).

Rețeaua polară a lui A. K. Boldîrev (fig. 2.4) reprezintă proiecția stereografică a sistemului de paralele și de meridiane de pe suprafața sferei pe planul ecuatorial. Punctul din care se privește se află în polul sud. Liniile sînt trasate din două în două grade sau din cinci în cinci grade. Meridianele sînt reprezentate prin drepte care pleacă radial din centrul proiecției; aceste drepte reprezintă de fapt arce ale căror raze sînt infinit de mari. Meridianul inițial, meridianul zero, se notează cu 0, iar mai departe, meridianele se indexează cu cifre, din zece în zece grade. Paralelele sînt reprezentate prin cercuri concentrice. Proiecția ecuatorului coincide cu circumferința proiecției, iar proiecția polului („paralela zero”), cu punctul din centrul proiecției. Longitudinile φ se măsoară de la meridianul zero, în sensul acelor de ceas, iar distanțele polare se măsoară pe meridian, de la centrul proiecției.

Rețeaua lui E. S. Fiodorov reprezintă o combinație între două rețele Wulf, rotite una față de alta cu 90° , și o rețea polară Boldîrev. Diviziunile sînt din cinci în cinci grade.

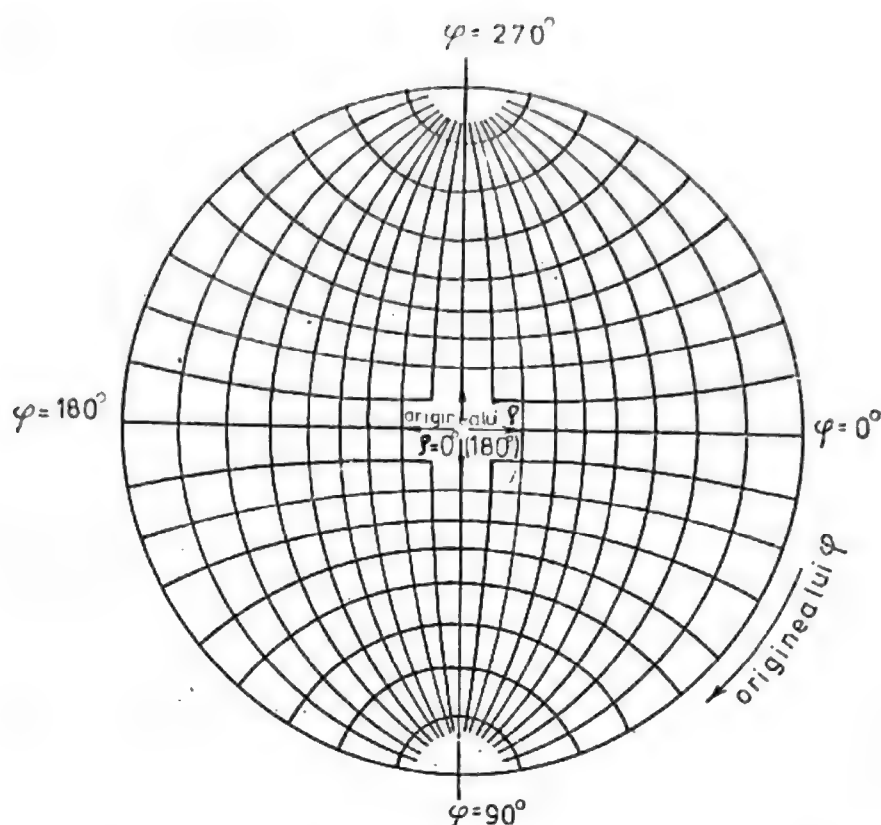


Fig. 2.3. Schema unei rețele Wulf și măsurarea coordonatelor cu ajutorul ei.

În § 24 va fi tratată metodică folosirii proiecțiilor stereografice și a rețelelor lui Wulf, Fiodorov și Boldîrev, pentru reprezentarea simetriei și a anizotropiei proprietăților cristalinelor.

Relația dintre proiecția sferică, proiecția stereografică, proiecția gnomostereografică și proiecția gnomonică este dată în figura 2.5 Proiecția direcției OA (v. fig. 2.1) dă, în proiecție sferică de rază r , un punct a , determinat prin coordonatele φ , ρ , în proiecție gnomonică (planul MM), punctul a_2 , în proiecție stereografică

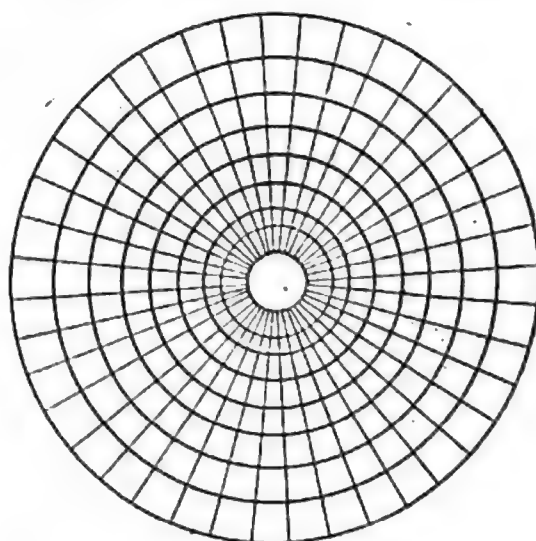


Fig. 2.4. Schema unei rețele Boldirev.

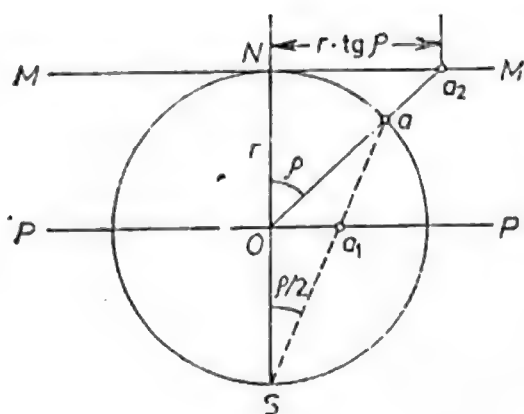


Fig. 2.5. Schemă pentru explicarea relațiilor dintre proiecțiile sferică, stereografică, gnomostereografică și gnomonică.

(planul PP), punctul a_1 . În proiecția gnomostereografică (planul PP), punctul a_1 , reprezintă proiecția planului perpendicular pe direcția Oa . Relațiile unghiulare din proiecții se văd în figură.

Relațiile dintre cele trei feluri de proiecții pot fi grupate în următorul tabel :

Proiecția	Reprezentarea	
	Unui plan	Unei drepte
Stereografică	Arc de cerc mare	Punct
Gnomostereografică	Punct	Arc de cerc mare
Gnomonică	Punct	Dreaptă

§ 3. ELEMENTE DE SIMETRIE SIMPLE, FINITE, ALE CRISTALELOR

Se numește *simetrie geometrică* a spațiului cristalin (sau a unei figuri) proprietatea spațiului (sau a figurii) de a coincide cu el însuși prin aplicarea unor transformări simetrice. *Operațiile* sau *transformările de simetrie* sînt reflexia, rotația, translația, care aduc spațiul (figura) în coincidență cu el însuși.

Simetria și anizotropia proprietăților fizice ale cristalelor apar pregnant în forma exterioară, de poliedru, a cristalelor. Menționăm că forma de poliedru cristalin real este totdeauna rezultatul nu numai al anizotropiei vitezei de creștere, ci și al condițiilor exterioare în care a crescut cristalul, cum ar fi : gradientul de temperatură, contactul cu cristalele vecine sau cu pereții cristalizorului, acțiunea forței de greutate, influența neomogenităților mediului ș.a. Făcînd abstracție de condițiile reale de creștere, vom examina, deocamdată, simetria poliedrelor cristaline ideale.

Se numește *figură simetrică* sau *poliedru simetric*, acea figură (poliedru) care poate fi adusă să coincidă cu ea însăși prin transformări simetrice.

Elementele de simetrie sînt conceptele ajutătoare (puncte, linii, drepte, planuri) cu ajutorul cărora se revelează simetria figurii (sau spațiului). În orice transformare simetrică toate distanțele dintre punctele figurii rămîn neschimbate, adică nu se produc întinderi, contracții, încovoieri etc.

Transformările simetrice pot fi clasificate în două tipuri :

1) *finite* sau *punctuale*, în care un singur punct al figurii rămîne pe loc și 2) *infinite* sau *spațiale*, în care nu rămîne pe loc nici un punct al figurii. Transformările simetrice finite corespund poliedrelor cristaline ideale, iar cele infinite, simetriei structurilor.

Pentru descrierea elementelor de simetrie vom utiliza simbolurile internaționale, introduse de Hermann și Mauguin și adoptate de Congresul Internațional al Cristalografilor. În literatura de fizică și în cea de cristalografie se utilizează adesea alte sisteme de notare, explicate în cele ce urmează.

Pentru reprezentarea elementelor de simetrie și a transformărilor simetrice vom utiliza proiecția stereografică. Semnele convenționale internaționale pentru reprezentarea elementelor de simetrie într-un plan de proiecție sînt date în tabelul 3.1.

Operații de simetrie finite, simple. Operațiile simple de simetrie sînt reflexia (oglundirea) și rotația. Ele sînt definite de următoarele elemente de simetrie.

Simbolul internațional

Planul de simetrie	m
Axa de simetrie	$n(n = 2, 3, 4, 6)$
Centrul de simetrie	$\bar{1}$

(Aici n , adică 1, 2, 3, 4, 6, reprezintă ordinul axei ; vezi în continuare.)

Planul de simetrie (m) este planul care împarte figura în două părți egale prin oglindire, părți care se află una față de alta ca obiectul față de imaginea lui în oglindă, ca mîna dreaptă față de mîna stîngă.

Într-un triunghi echilateral, de exemplu, există trei planuri de simetrie, normale la planul triunghiului ; proiecțiile lor pe planul triunghiului sînt date în figura 3.1. Dacă este vorba despre simetria unui triunghi obișnuit, adică despre o figură geometrică formată din trei drepte matematice, atunci el nu mai are planuri de simetrie. Dacă însă triunghiul considerat este o figură materială, atunci simetria poate fi mai complicată. Dacă triunghiul este decupat din hîrtie albă, de pildă, astfel încît atît fața cît și rever-

Tabelul 3.1

Elementele de simetrie ale figurilor fluide și notațiile lor standard

Denumirea		Notația internațională	Reprezentarea în raport cu planul desenului	
			Perpendiculară	Paralelă
Plan de simetrie		m	$\parallel \quad \parallel \quad =$	
Centru de simetrie		$\bar{1}$		
Axe de simetrie	de rotație	binare (diagonale, digire)	2	
		ternare (trigonale, trigire)	3	
		cuaternare (tetragonale, tetragire)	4	
		senare (hexagonale, hexagire)	6	
	de inversie	cuaternare	$\bar{4}$	
		senare	$\bar{6}$	
		ternare	$\bar{3}$	

sul sînt identice, atunci încă mai există un plan de simetrie care coincide cu planul triunghiului. Dacă însă triunghiul are „fața” și „reversul” diferite, de exemplu pe o față este alb, iar pe cealaltă negru, atunci nu mai există un asemenea plan de simetrie.

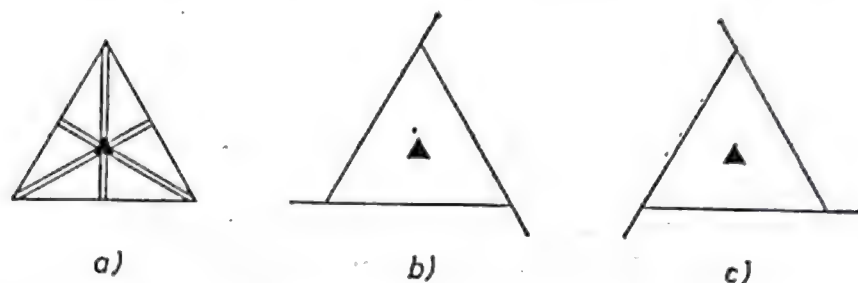


Fig. 3.1. Simetria triunghiului : axa 3 care este neutră și cele trei planuri de simetrie (a), axa 3 este dreaptă, fără planuri (b), axa 3 este stîngă, fără planuri (c).

Într-un cub (fig. 3.2) se pot număra nouă planuri de simetrie, trei dintre ele fiind perpendiculare la fețele cubului, iar șase după planurile diagonale. În partea dreaptă a figurii este arătată proiecția stereografică a planurilor de simetrie ale cubului.

Se numește *axă de simetrie* (n) linia dreaptă în jurul căreia, prin rotație, se obține aceeași figură. Unghiul de rotație elementar, adică unghiul de rotație cel mai mic, care aduce figura în coincidență cu ea însăși, este un submultiplu al lui 2π ; în caz contrar figura nu se va suprapune cu ea însăși printr-o rotație completă. Numărul n este așa-numitul *ordin al axei*; el indică de câte ori se va suprapune figura cu ea însăși, la o rotație completă în jurul axei.

În figura 3.1 sînt reprezentate trei triunghiuri echilaterale. Fiecare are o axă de simetrie de ordinul trei (axă 3). Primul triunghi (a) are, în afară de aceasta, trei planuri de simetrie (perpendiculare la planul desenului), pe cînd triunghiul al doilea și triunghiul al treilea (b și c) nu au astfel de planuri de simetrie; ele au numai cîte o axă de simetrie dreaptă sau stîngă. Considerînd acum aceste triunghiuri ca figuri materiale, le putem defini ca triunghiuri simetrice drepte sau stîngi.

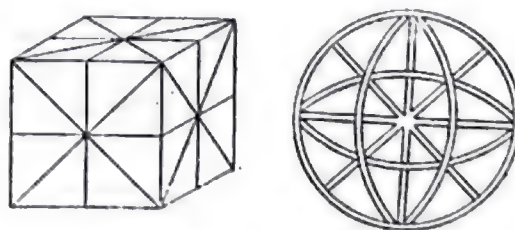


Fig. 3.2. Cele trei planuri de simetrie de coordonate și cele șase planuri de simetrie diagonale ale unui cub.

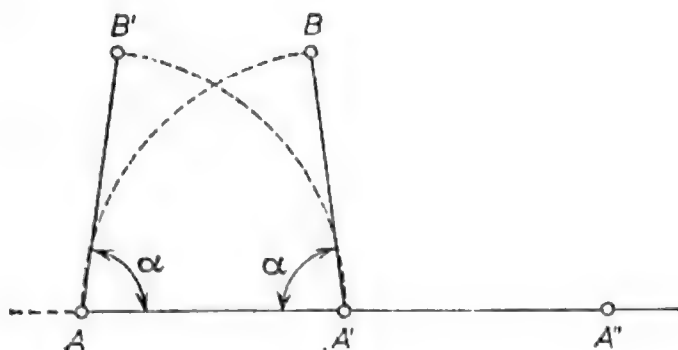


Fig. 3.3. Schemă pentru demonstrarea imposibilității existenței axei de simetrie de ordinul cinci, într-un mediu cristalin.

Orice figură, geometrică ori materială, are o axă de simetrie de ordinul 1 (axă 1); într-adevăr, orice corp rotit cu 360° în jurul oricărei direcții se suprapune complet cu el însuși.

Figura geometrică cea mai simetrică este sfera: fiecare din mulțimea infinită a diametrelor sale este o axă de ordin infinit (∞); de asemenea, prin fiecare diametru trece o mulțime infinită de planuri de simetrie.

Conul are o axă de simetrie de ordin infinit, care coincide cu axa sa. Conul se confundă cu sine dacă este rotit cu orice unghi în jurul acestei axe. Totodată, orice plan care trece prin această axă este un plan de simetrie al conului; prin urmare, conul are o mulțime infinită de planuri de simetrie.

Să trecem din nou de la figura geometrică la o figură materială. Fie, de exemplu, un con hașurat sau lipit cu pluș, considerat astfel încât toți perișorii să fie neteziți într-o singură direcție, sau — mai simplu — fie un con care se rotește cu regularitate în jurul axei sale (exemplul este luat din cartea lui A. V. Șubnikov, 1951). Conul se va suprapune, ca și mai înainte, cu el însuși prin rotire în jurul axei sale cu orice unghi, adică el are și acum o axă de simetrie, însă își pierde toate planurile sale de simetrie: rotirea uniformă a modificat simetria figurii materiale.

În corpurile din natură — flori, fructe, scoici etc. — în figurile geometrice, în operele artistice se găsesc axe de simetrie de orice ordin, de la 1 la ∞ . În formele geometrice ale cristalelor sînt posibile axele de simetrie 1, 2, 3, 4, 6. În cristale nu sînt posibile axe de ordinul cinci și de ordine mai mari ca șase.

Să ne imaginăm că o axă de simetrie de ordinul n , de unghi de rotație $\alpha = 2\pi/n$, iese normal din planul desenului în punctul A , care este un nod din șirul A, A', A'', \dots , așa cum se vede în figura 3.3. Atunci, evident, în fiecare punct omolog al acestui șir va ieși, de asemenea, o astfel de axă. Dacă o rotire cu unghiul α în jurul axei din punctul A deplasează punctul A' în poziția B , atunci o rotire de același unghi, în jurul axei care iese din punctul A' va duce punctul A în poziția B' . Punctele B, B' ,

...va trebui să formeze un șir de puncte omoloage, șir paralel cu șirul AA' , astfel încît distanța BB' va fi egală cu

$$BB' = Nt,$$

unde t este translația AA' , iar N un număr întreg. Deoarece

$$BB' = t - 2t \cos \alpha,$$

rezultă că

$$t - 2t \cos \alpha = Nt,$$

de unde

$$\cos \alpha = \frac{1 - N}{2}.$$

Din condiția

$$-1 \leq \cos \alpha \leq +1,$$

se obțin toate valorile posibile ale unghiurilor α :

N	-1	0	1	2	3
$\cos \alpha$	1	1/2	0	-1/2	-1
α	0°	60°	90°	120°	180°
Ordinul axei de simetrie	1	6	4	3	2

Prin urmare, condiției de periodicitate și de continuitate a șirului de puncte omoloage îi vor corespunde numai axele de simetrie 2, 3, 4 și 6. Analog se demonstrează că atât în rețeaua plană cît și în rețeaua spațială nu pot exista decît axe de simetrie tot numai de aceste ordine. În cristale nu pot exista axe de simetrie de ordinul cinci, șapte sau de ordine mai mari.

Este interesant de remarcat că axa de ordinul cinci, imposibilă în cristale, s-a pus în evidență în cercetările din ultimii ani ale structurilor biologice (ale „cristalelor de natură vie”). „Se poate crede — scrie acad. N. V. Belov — că axa de ordinul cinci este pentru organisme vii un original instrument al luptei pentru existență, de garanție împotriva împietririi, împotriva cristalizării, al cărei prim pas ar fi « prinderea » rețelei” (Belov, 1962).

În figura 3.4 se arată că poligoanele cu axe de simetrie 2, 3, 4 și 6 acoperă planul simetric și continuu, așa cum ar fi, de exemplu, în cazul unui fagure (axă 6). Este imposibil să se completeze simetric și continuu un plan cu pentagoane, septagoane ori



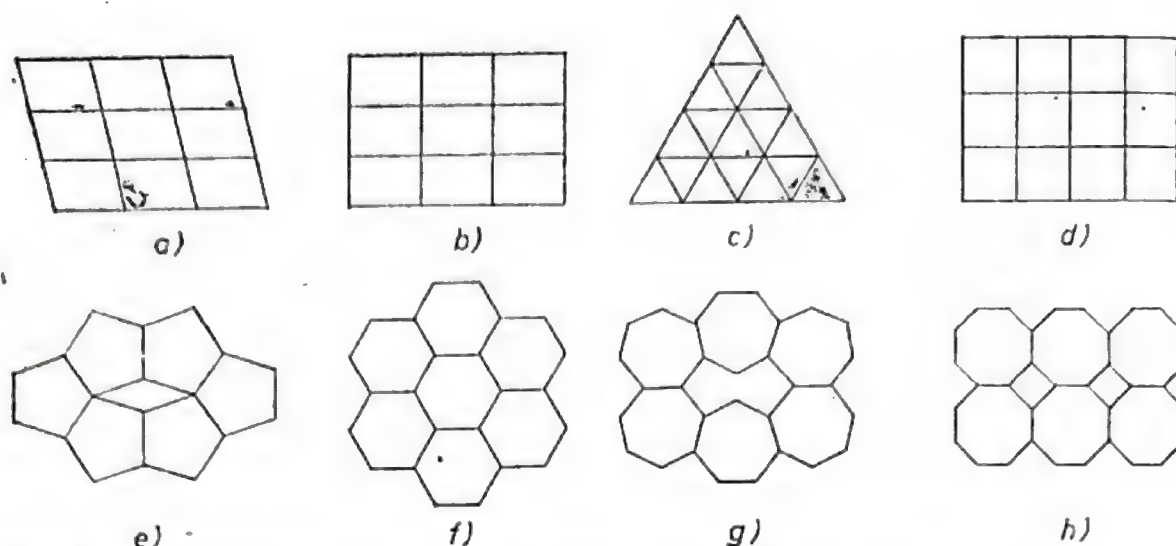


Fig. 3.4. Completarea planului cu poligoane avind axe de simetrie 1 (a), 2(b), 3(c), 4(d), 5(e), 6(f), 7(g), 8(h).

octogoane, fără să rămână „găuri”, care strică simetria. Octogonele pot fi observate adesea în configurația parchetelor, de pildă; la prima vedere ni se poate părea că într-o asemenea configurație există o axă de simetrie de ordin opt. În realitate, aici întâlnim un caz aparte, în care octogonul regulat nu are axă de simetrie 8, ci numai axă 4 : fiecare octogon este înconjurat de patru pătrate mai mici, care umplu golurile. Fiecare octogon în parte are, firește, axă de simetrie 8, dar pătrățelele de pe laturile lui i-au scăzut ordinul simetriei axei lui la 4.

Să așezăm același octogon în centrul unui cerc (fig. 3.5, a). Dacă este examinat separat, cercul are o axă de simetrie de ordin infinit (axă ∞) și un număr infinit de planuri de simetrie, care trec prin ea. Axa de simetrie de ordin infinit include în ea orice

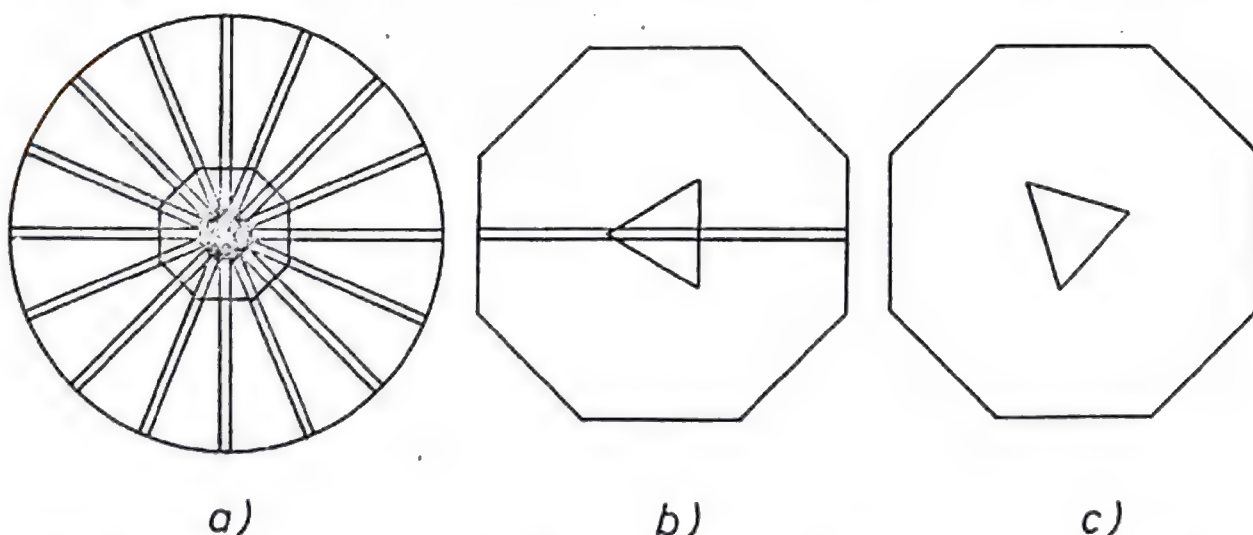


Fig. 3.5. Ilustrarea principiului Curie : a) a dispărut axa de simetrie ∞ a cercului, rămânind axa 8 și cele opt planuri de simetrie ; b) a dispărut axa ∞ și axa 8, a rămas numai planul comun de simetrie ; c) nu există elemente de simetrie comune.

rotații, adică axe de simetrie de orice ordin. Însă octogonul înscris în cerc „interzice” toate rotirile, în afară de cele care se fac cu un unghi de $2\pi/8$ sau multipli ai acestuia : mai rămân comune, pentru cerc și octogon, axa 8 și opt planuri de simetrie.

Un alt exemplu : suprapunând peste octogon un triunghi echilateral (fig. 3.5, b), vom vedea că mai „supraviețuiește” numai un singur plan de simetrie, comun ambelor figuri, dar și acesta numai în cazul în care triunghiul este așezat simetric.

Acestea sînt exemple geometrice particulare ale *principiului general de simetrie* sau *principiului lui Curie*, conform căruia în cazurile în care se suprapun două fenomene sau un fenomen și mediul său ambiant se păstrează numai acele elemente de simetrie care le sînt comune (vezi § 25).

Studiind simetria unei figuri trebuie să facem o distincție clară dacă este vorba numai despre simetria figurii însăși, fără a lua în considerație și ceea ce o înconjură, sau despre simetria figurii împreună cu tot ce o înconjură. Formele poliedrelor cristaline reale poartă totdeauna amprenteale condițiilor de creștere și de simetrie ale mediului în care a fost format cristalul. În această carte vom examina însă simetria poliedrului cristalin ideal, fără a lua în considerație mediul înconjurător.

Într-o figură geometrică pot exista cîteva axe de simetrie de diferite ordine precum și planuri de simetrie și alte elemente de simetrie. De exemplu, cubul are trei axe 4 (ele trec prin centrele fețelor ca axele de coordonate ale unui sistem triortogonal), patru axe 3 (prin perechile de vîrfuri opuse) și șase axe 2 (prin mijloacele muchiilor opuse); aceste axe de simetrie și proiecțiile lor stereografice sînt reprezentate în figura 3.6.

Să examinăm două puncte dintr-o proiecție (fig. 3.7). Punctul B poate fi obținut din punctul A printr-o transformare sim-

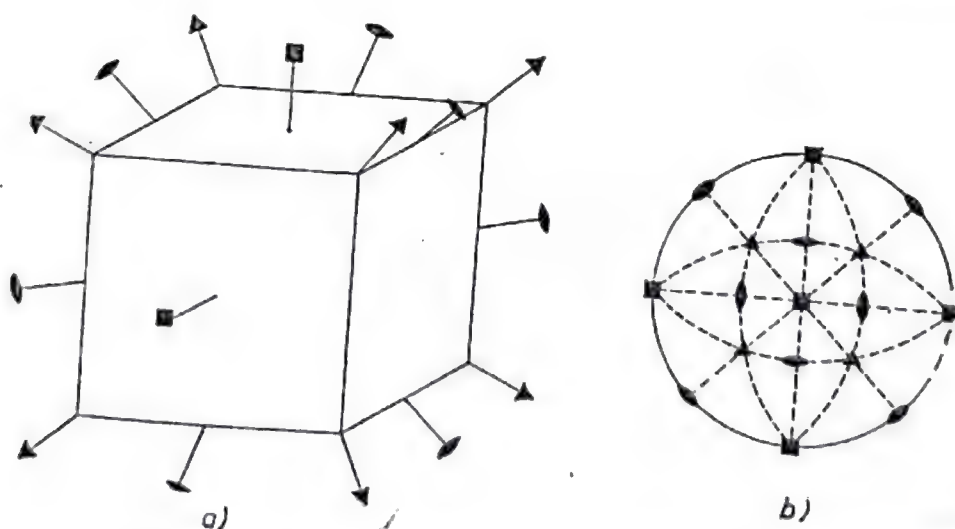


Fig. 3.6. Axele de simetrie ale cubului (a) și proiecțiile lor stereografice (b).

trică, oglindind punctul A în planul de simetrie m (fig. 3.7, a), sau rotind punctul A în jurul axei de simetrie 2, care se află în planul de proiecție (fig. 3.7, b). Cum putem afla care este transformarea care s-a produs de fapt? Deosebirea devine evidentă dacă se rotește simetric sau se oglindește nu un punct, ci o figură materială: un triunghi care are fața albă și reversul negru. Axa 2 (fig. 3.7, b) rotește triunghiul „de pe față pe dos”, pe cind planul de simetrie (fig. 3.7, a) îl reflectă, fără a-l roti. Dacă triunghiul se oglindește într-un plan de simetrie m , care coincide cu planul desenului, atunci partea neagră a lui se confundă cu cea albă; vom reprezenta acest fapt printr-un punct negru pe fond alb (fig. 3.7, c)*.

Se numește *centru de simetrie* (\bar{I}) (*centru de inversie*, *centrul egalității inverse*) un anumit punct din interiorul unei figuri, care se caracterizează prin aceea că orice dreaptă care trece prin el întâlnește punctele analoage (corespondente) ale figuri de ambele părți ale lui și la distanțe egale. Astfel, transformarea simetrică în centrul de simetrie este o reflexie față de un punct, care întoarce o figură „de pe față pe dos” (fig. 3.8, a).

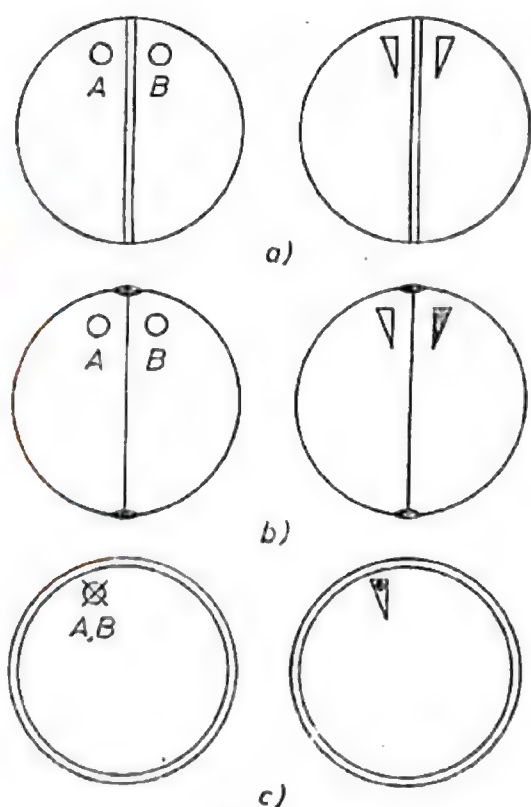
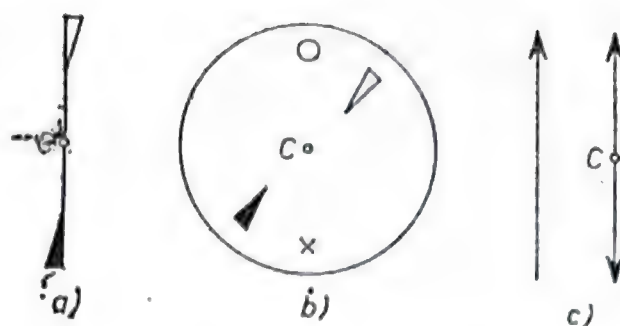


Fig. 3.7. Punctul (în coloana stângă) și triunghiul material care are față anterioară și față posterioară (în coloana din dreapta) sînt transformate simetric de către un plan de simetrie normal la planul desenului (a), de către o axă 2 care se află în planul desenului (b), de către un plan de simetrie care coincide cu planul desenului (c).

* „Un triunghi alb de pe semisfera anterioară, oglindindu-se în planul de simetrie, trece pe semisfera posterioară, plasindu-se exact sub el, astfel încît nu poate fi văzut. Făcînd un orificiu în triunghiul alb vom vedea prin el triunghiul al doilea, care ne va părea negru. Acesta este sensul punctului negru, desenat în centrul triunghiului”. (A. V. Șubnikov, 1951).

Fig. 3.8. Transformare simetrică realizată de către un centru de simetrie (a), proiecția stereografică a unor fețe simetrice față de un centru de simetrie (b), săgeată polară (fără centru de simetrie) și nepolară (cu centru de simetrie) (c).



În figura 3.8, b sînt reprezentate proiecțiile stereografice în cazul a două fețe ale cristalului, simetrice față de centrul de simetrie, una dintre ele aflîndu-se pe semisfera superioară a sferei proiecțiilor (cerculeț), iar cealaltă pe semisfera inferioară (cruciuliță). Aceeași transformare este ilustrată folosind triunghiul alb-negru; reflexia în centrul de simetrie rotește triunghiul „de pe față pe dos”.

În cristalele în care există centru de simetrie nu pot exista drepte polare. Se numește dreaptă *polară* dreapta care are proprietăți diferite în sensuri diferite (fig. 3.8, c). Să considerăm, de pildă, axa de simetrie de ordinul patru dintr-o prismă tetraedrică, sau dintr-o piramidă tetragonală. Cele două baze ale prisme sînt la fel; prin reflexia în centrul de simetrie, sau în planul transversal de simetrie, o extremitate a axei 4 va coincide cu cealaltă și vice-versa; nu există nici o diferență între sensurile unei axei 4 — axa *nu este polară*. În piramidă există, de asemenea, o axă patru, însă prin nici un fel de operații de simetrie, proprii piramidei însăși, nu poate fi adus vîrfurile piramidei să coincidă cu baza sa, adică o extremitate a axei cu cealaltă — axa de simetrie 4 a unei piramide este polară. Aceleași axe 4 ale unui cub nu mai sînt însă polare, dat fiind că în cub există un centru de simetrie. Axa de simetrie a conului, de pildă, este polară, pe cînd axa de simetrie a cilindrului nu mai este polară. Pentru amănunte se poate consulta anexa C.

Setul $m, 2, 3, 4, 6, \bar{1}$ epuizează elementele de simetrie simple, posibile într-un cristal.

Orice element de simetrie al unei figuri dă naștere unui set de operații de simetrie: axa 3 — rotațiile figurii cu 120° și 240° ; axa 4 — cu $90^\circ, 180^\circ$ și 270° ; axa 6 — cu $60^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 240^\circ$ și 300° . Toate rotațiile generate de o axă de simetrie pot fi considerate rezultat al repetării unei singure rotații elementare; pentru axa 2 aceasta este rotația cu 180° , pentru axa 4 — cu 120° , pentru axa 6 — cu 60° . Spre deosebire de axele de simetrie, notate cu cifre drepte, vom nota rotațiile elementare cu simbolul cursiv al axei, la care se adaugă un indice, care arată cu ce axă de coordonate coincide respectiva axă de simetrie: $2_x, 3_z$ etc. Utilizînd indicii

din cristalografie, vom scrie elementele de simetrie în felul următor : $2_{[100]}$, $3_{[100]}$ etc. Rezultatul repetării de câteva ori a unei rotații elementare este luat drept exponentul corespunzător puterii rotației elementare ; dacă, de exemplu, rotația cu 60° este notată 6_z , atunci rotațiile în jurul aceleiași axe cu 120° , 180° , 240° , 300° se notează respectiv cu 6_z^2 , 6_z^3 , 6_z^4 , 6_z^5 . Evident sînt adevărate egalitățile

$$6_z^2 = 3_z ; 6_z^3 = 2_z ; 6_z^4 = 2_z ; 6_z^5 = 2_z.$$

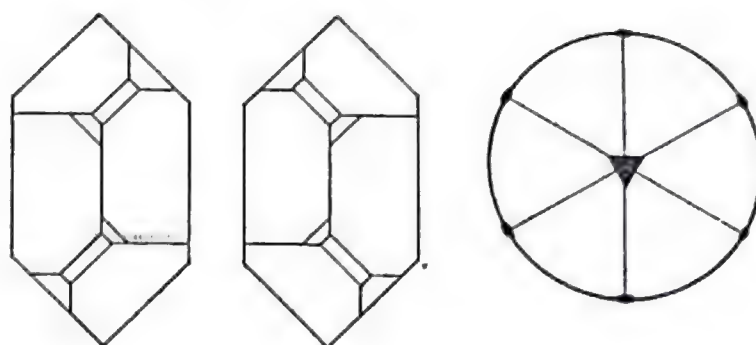
Operația de reflexie într-un plan de simetrie m se notează cu simbolul planului însoțit de un indice, care arată axa de coordonate ce este perpendiculară la acest plan : m_x sau $m_{(100)}$. *Operația de inversie*, adică reflexia în centrul de simetrie $\bar{1}$, se notează cu simbolul $\bar{1}$.

În afară de aceasta, dintre operațiile de simetrie face parte și *identitatea* sau *operația unitate* ; aceasta „este operația de transformare a figurii în ea însăși, cînd o lăsăm pe loc” (A. V. Șubnikov, 1951 ; termenul de „identitate” a fost introdus tot de Șubnikov). Identitatea se notează cu simbolul 1 .

Dacă figura are câteva elemente de simetrie, atunci ansamblul operațiilor de simetrie, generate concomitent de ele, se complică în mod corespunzător.

Să examinăm un exemplu. Fie ca figura să aibă o axă 3 și, perpendicular pe ea, axa 2 (aceasta este simetria cristalelor de cuarț, figura 3.9). Axa 3 generează rotațiile 3 și 3^2 , iar axa 2 rotația 2_x . Deoarece fiecare operație de simetrie transformă figura (poliedrul ideal de cuarț) în ea însăși, rezultatul aplicării succesive a cîtorva operații de simetrie — care se numește *produsul* acestor operații — transformă, de asemenea, figura în ea însăși ; deci și produsul este una dintre operațiile de simetrie. Să examinăm rezultatul efectuării succesive a două operații de simetrie : mai întîi 3_z , apoi 2_x ; în proiecție (fig. 3.10, *a*), același rezultat se obține prin aplicarea unei singure operații, și anume 2_u . În figura 3.10, *a*, triunghiul *A*, printr-o rotație cu 120° în jurul axei 3_z , ajunge în poziția *B*, iar după aceasta, prin rotația cu 180° în jurul axei 2_x , în poziția *C*. Dar trecerea *A* în *C* se poate face și dintr-odată, prin rotirea în jurul axei 2_u . Acest rezultat se scrie astfel : $2_x 3_z = 2_u$. În dreapta „produsului” se scrie acea operație care s-a efectuat prima. Ordinea de scriere este esențială : figura 3.10, *b* ilustrează cum modificarea ordinii operațiilor a dus la un alt rezultat : $3_z 2_x = 2_v$. Într-adevăr, în figura 3.10, *b* triunghiul *A*, în urma rotației cu 180° în jurul axei 2_x ajunge în poziția *D*, iar apoi printr-o rotație cu 120° în jurul axei 3_z , în

Fig. 3.9. Cristalul de cuarț stâng și cristalul de cuarț drept și proiecția stereografică a elementelor lui de simetrie.



poziția E ; se poate transpune A în E și direct, printr-o rotație cu 180° în jurul axei 2_y .

Rezultatele tuturor perechilor posibile de operații de simetrie aplicate succesiv unui cristal sînt trecute în tabelul înmulțirii (după cum se va arăta în § 5, acesta este tabelul înmulțirii grupului 32).

Factorii		Din dreapta					
		1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_u
Din stînga	1	1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_u
	3_z	3_z	3_z^2	1	2_y	2_u	2_x
	3_z^2	3_z^2	1	3_z	2_u	2_x	2_y
	2_x	2_x	2_u	2_y	1	3_z^2	3_z
	2_y	2_y	2_x	2_u	3_z	1	3_z^2
	2_u	2_u	2_y	2_x	3_z^2	3_z	1

După cum se vede din tabel, datorită existenței în cristalul de cuarț a axelor 3_z și 2_x , rezultă existența a încă două elemente de simetrie — axele 2_y și 2_u . Astfel, dacă o axă de simetrie 2 este perpendiculară pe axa 3, atunci există în total trei axe 2, perpendiculare pe axa 3. Pe baza acestui exemplu particular se deduce **teorema 1**, a înmulțirii operațiilor de simetrie: dacă o axă de simetrie 2 este perpendiculară pe o axă de simetrie de ordinul n ,

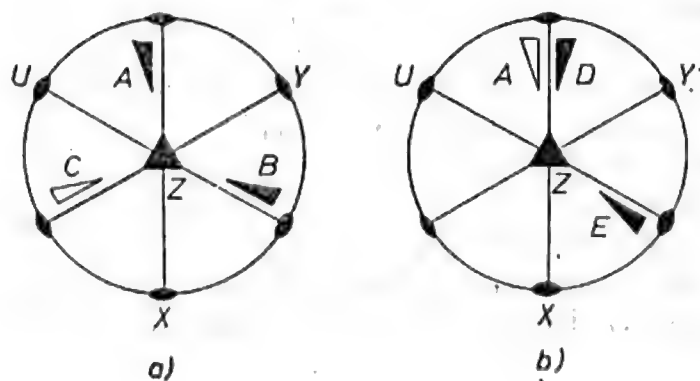


Fig. 3.10. Rezultatul aplicării succesive a două operații de simetrie:

a) $2_x 3_z = 2_u$; b) $3_z 2_x = 2_y$.

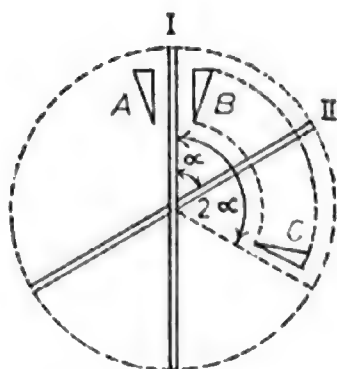


Fig. 3.11. Reflexia pe două planuri de simetrie care se intersectează este echivalentă cu o rotație în jurul unei axe de simetrie.

atunci există în total n axe 2, perpendiculare pe axa n . Combinația dintre axa de simetrie de ordinul n cu o axă de simetrie 2, perpendiculară pe ea, se notează n_2 ; în cazul examinat avem combinația 32 (vezi figura 3.9).

Vom formula, în continuare, încă o serie de teoreme referitoare la înmulțirea operațiilor de simetrie. Aici sînt date numai exemple ilustrative, lămuritoare, demonstrațiile riguroase fiind cuprinse în anexa D.

Teorema 2. Dreapta care este intersecția a două planuri de simetrie este totdeauna axa de simetrie a rotației cu un unghi de două ori mai mare decît unghiul dintre planuri. Demonstrația se vede din figura 3.11. Reflexia față de planul I trece triunghiul A în poziția B , iar reflexia față de planul II îl trece din poziția B în C . Dar trecerea $A - C$ se poate efectua și prin rotirea în jurul axei n cu unghiul 2α , adică $m_{II} \cdot m_I = n_{2\alpha}$.

Teorema 2a (reciproca teoremei 2). Rotația în jurul unei axe de simetrie poate fi înlocuită printr-o dublă reflexie față de planuri de simetrie. În acest caz unul dintre planuri se ia de-a lungul axei arbitrar, iar cel de al doilea plan trebuie să formeze cu primul un unghi egal cu jumătate din unghiul de rotire în jurul axei, și anume în sensul acestei rotații. Demonstrația este evidentă din aceeași figură, 3.11.

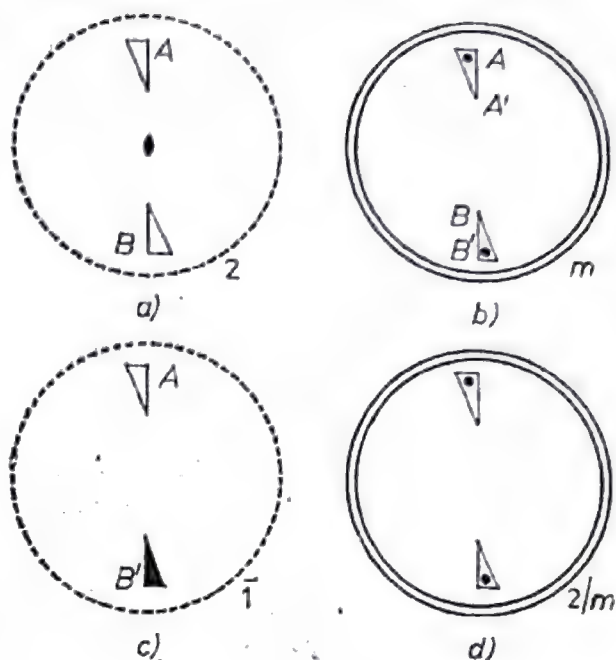
Teorema 3. Punctul de intersecție a unei axe de simetrie de ordin par cu un plan de simetrie perpendicular pe ea este un centru de simetrie. În figura 3.12 axa 2_z , perpendiculară la planul m_z , duce triunghiul A în poziția B (fig. 3.12, a), planul m_z dă o reflexie $A - A'$, $B - B'$ (fig. 3.12, b), însă A și B' , precum și A' și B sînt legate și de centrul de simetrie generat (fig. 3.12, c).

Combinația dintre o axă de simetrie de ordinul n și un plan de simetrie perpendicular pe ea se notează n/m ; în cazul discutat avem combinația $2/m$ (fig. 3.12, d).

Analog se deduc următoarele teoreme.

Teorema 3a. Dacă pe o axă de simetrie pară există un centru de simetrie, atunci planul de simetrie va fi perpendicular pe această axă.

Fig. 3.12. O axă de simetrie pară și un plan perpendicular pe ea dau naștere unui centru de simetrie.



Teorema 3b. Dacă printr-un centru de simetrie trece un plan de simetrie, atunci, prin acest centru va trece o axă pară de simetrie, perpendiculară la planul considerat.

Teorema 4. Dacă după o axă de simetrie de ordinul n trece un plan de simetrie, atunci există un număr n de astfel de planuri; această combinație se notează nm (se demonstrează ca și teorema 1; vezi figura 3.11).

Prin înmulțirea operațiilor de simetrie obținem toate operațiile deja enumerate, plus încă una nouă: produsul dintre o rotație elementară n și inversia $\bar{1}$, indiferent de ordine; aceasta este operația de simetrie denumită rotație elementară-inversie, $\bar{n} : \bar{1} \cdot n = n \cdot \bar{1} = \bar{n}$.

Axa în jurul căreia au loc rotații de inversie se numește *axă de simetrie de inversie*. Ca și axele de rotație, axele de inversie din cristale pot fi numai de ordinele 1, 2, 3, 4 și 6.

Dintre rotațiile elementare-inversii fac parte două dintre operațiile enumerate mai sus.

Acțiunea axei de inversie 1 este echivalentă cu acțiunea centrului de simetrie, iar rotația-inversie în jurul axei $\bar{2}$ este echivalentă acțiunii unui plan de simetrie: $\bar{2} \equiv m$. Celelalte rotații de inversie sînt noi.

Repetarea unor rotații elementare-inversii duce la următoarele rezultate:

$$\begin{aligned} \bar{3}_z^2 &= 3_z; & \bar{3}_z^3 &= 1; & \bar{3}_z^4 &= 3_z; \\ \bar{4}_z^2 &= 2_z; & \bar{4}_z^3 &= 4_z; & \bar{4}_z^4 &= 1. \end{aligned}$$

De exemplu, rotația de inversie în jurul axei $\bar{3}$, normală la un plan (fig. 3.13, a), adică rotația cu 120° concomitent cu oglindirea în centrul de simetrie duce triunghiul (sau punctul) A în poziția B , apoi în poziția C ș.a.m.d. Analog, în figura 3.13, b se vede cum triunghiul (sau punctul) A , prin rotirea cu 90° și reflexia concomitentă în centru (axa $\bar{4}$), trece în B , apoi în C etc.

Pentru descrierea simetriei poliedrelor cristaline uneori se mai utilizează încă o operație de simetrie — *rotația-oglindire* — care este o rotație în jurul axei de simetrie urmată de oglindirea într-un plan de simetrie perpendicular pe această axă. Axele de oglindire-rotație $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4, \Lambda_6$ sînt echivalente axelor de simetrie de inversie: $\Lambda_1 = \bar{2} = 4_2 = m, \Lambda_2 = \bar{1}, \Lambda_3 = \bar{6}, \Lambda_4 = \bar{4}, \Lambda_6 = \bar{3}$. Trebuie să remarcăm că Λ_6 nu este identică cu $\bar{6}$, ci cu $\bar{3}$, iar Λ_3 , la rîndul ei, nu este identică cu $\bar{3}$, ci cu $\bar{6}$. La fel se întîmplă cu axele $\Lambda_1 \equiv \bar{2}$, iar $\Lambda_2 \equiv \bar{1}$.

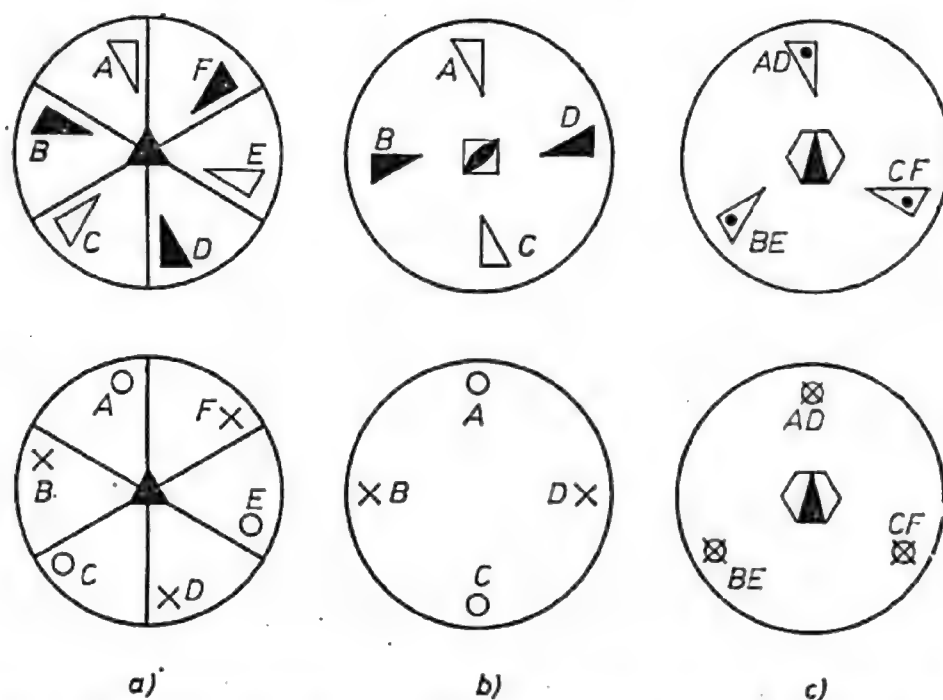
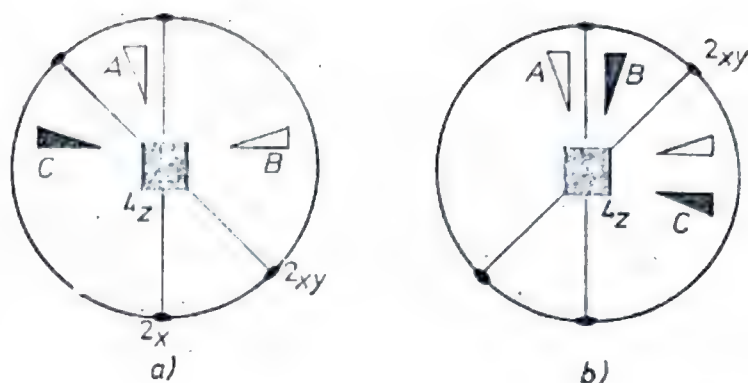


Fig. 3.13. Transformările de simetrie produse de către axele de simetrie de inversie $\bar{3}$ (a), $\bar{4}$ (b), $\bar{6}$ (c) ale unui triunghi material (rîndul de sus) sau ale unui punct (rîndul de jos) în reprezentare standard, în proiecție stereografică.

Rotația combinată cu inversia reprezintă o rotație în jurul unei axe de simetrie și reflexia în centrul de simetrie, aplicate simultan; aceste două operații nu se pot separa. Prin urmare, existența în cristal a unei axe de simetrie de inversie nu înseamnă că în cristal există și un centru de simetrie și nu contrazice existența direcțiilor polare (însă axa de inversie însăși, evident, nu va fi polară!).

Așadar, simetria poliedrelor cristaline poate fi descrisă complet cu ajutorul elementelor de simetrie $m, \bar{1}, 2, 3, 4, 6, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$.

Fig. 3.14. Teorema lui Euler :
 $2_z \cdot 4_z = 2_{xy}$; $4_z \cdot 2_x = 2_{xy}$.



Terminând întocmirea listei elementelor de simetrie, să ne întoarcem la teoremele privind înmulțirea lor.

Teorema 5 (teorema lui Euler). Rezultanta a două axe de simetrie concurente este o a treia axă, care trece prin punctul lor de intersecție.

Figura 3.14 servește pentru ilustrarea acestei teoreme. Axa 4_z realizează trecerea $A \rightarrow B$, axa $2_x - B \rightarrow C$, însă trecerea $A \rightarrow C$ se poate face dintr-odată, prin rotirea în jurul axei 2_{xy} , adică

$$2_x \cdot 4_z = 2_{xy}.$$

Aceste operații se pot aplica într-o altă ordine :

operația 2_x produce trecerea $A \rightarrow B$,
 „ 4_z „ „ $B \rightarrow C$,
 „ 2_{xy} „ „ $A \rightarrow C$,

adică

$$4_z \cdot 2_x = 2_{xy}.$$

Să ilustrăm teorema lui Euler cu ajutorul proiecției. În figura 3.15, A și B sînt urmele axelor de simetrie cu unghiurile de rota-

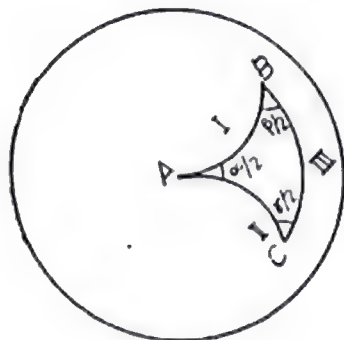


Fig. 3.15. Ilustrarea teoremei lui Euler cu ajutorul unei proiecții stereografice.

ție $\alpha = 2\pi/n$ și, respectiv, $\beta = 2\pi/m$. Din punctul de intersecție a acestor axe, ca centru, descriem o sferă și o proiectăm în planul desenului, rotind-o astfel încât axa A să cadă în centrul cercului proiecțiilor. Conform teoremei 2a, rotația în jurul axei A poate fi reprezentată ca două reflexii pe planurile de simetrie, primul dintre planuri avînd dreptul să-l luăm arbitrar, iar al doilea va face cu el unghiul $\alpha/2$; să ducem primul plan după axa B . Analog vom înlocui rotația în jurul axei B cu două reflexii pe planuri care se intersectează, formînd unghiul $\beta/2$, ducînd primul plan după A . Produsul este

$$m_I \cdot m_{II} = 1,$$

adică rezultatul a două reflexii succesive față de același plan face ca figura să rămînă pe loc. Rămîn cele două planuri, m_{II} și m_{III} , care se intersectează sub unghiul $\gamma/2$, fiind, conform teoremei 2, echivalente cu axa de simetrie C , cu unghiul de rotație $\gamma = 2\pi/p$. Teorema este demonstrată.

Mai sus s-a arătat că axele de simetrie din cristale pot fi numai de ordinul 2, 3, 4 și 6. Cîte combinații ale acestor axe sînt posibile într-un cristal?

Efectuînd în figura 3.15 toate rotațiile posibile în jurul axelor A , B , C ($A, A^2, A^3, \dots, B, B^2, B^3, \dots$ etc.), obținem, evident, pe sferă n ieșiri ale axei A , m ieșiri ale axei B și p ieșiri ale axei C , iar ducînd planurile de simetrie dintre ele, care pe sferă se reprezintă ca arce de cercuri mari, vom obține pe suprafața sferei o rețea de triunghiuri sferice. Din trigonometria sferică se știe că suma unghiurilor unui triunghi sferic, S , este

$$180^\circ \leq S \leq 3 \cdot 180^\circ.$$

Apoi, din condiția ca axele A , B , C să fie numai axe 2, 3, 4, 6, rezultă că unghiurile dintre laturile triunghiurilor pot fi numai de 90° , 60° , 45° , 30° . Prin urmare, pot fi stabile numai combinațiile de axe de simetrie enumerate mai jos :

Unghiurile	Suma unghiurilor	Combinația de axe	Sistemul cristalografic
$90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	270°	2, 2, 2	Rombic
$60^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	240°	3, 2, 2	Trigonal
$45^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	225°	4, 2, 2	Tetragonal
$30^\circ, 180^\circ, 180^\circ$	390°	6, 2, 2	Hexagonal
$60^\circ, 60^\circ, 90^\circ$	210°	3, 3, 2	Cubic
$45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$	195°	4, 3, 2	

În ultima coloană sînt date denumirile sistemelor cristalografice, explicate în paragraful care urmează.

§ 4. CATEGORII, SISTEME ȘI SINGONII CRISTALOGRAFICE

În funcție de simetria geometrică, de formele de creștere și de simetria proprietăților fizice, cristalele se împart în categorii, sisteme și singonii.

Înainte de a face cunoștință cu categoriile, să introducem noțiunea de direcții particulare într-un cristal. Direcția singulară, ce nu se mai repetă într-un cristal, se numește *direcție particulară* sau *direcție unică* (definiția nu se referă numai la cristale, ci la orice poliedru simetric). De exemplu, axa 6 dintr-un fulg de zăpadă, axa 4 dintr-o piramidă tetraedrică și dintr-o prismă tetraedrică sau axa 6 dintr-un creion hexaedric sînt direcții particulare: prin nici unul dintre celelalte elemente de simetrie, existente în aceste poliedre, nu le putem repeta astfel încît să obținem încă o axă 4 sau o a doua axă 6.

Într-un cub axa 4 nu este unică; sînt trei asemenea axe și fiecare dintre ele poate fi confundată cu alta de același fel, de pildă, prin reflexia pe oricare dintre cele șase planuri de simetrie diagonale ale cubului. Nu numai axele de simetrie, ci oricare direcție din cub se repetă obligatoriu simetric, cu alte cuvinte într-un cub nu există direcții unice. Direcțiile care se repetă într-un cristal, legate între ele prin elemente de simetrie, se numesc *direcții simetric echivalente*.

În funcție de numărul de direcții particulare (unice) și de axele de simetrie existente, cristalele se împart în trei categorii:

categoria superioară — nu există direcții unice, există cîteva axe de simetrie de ordin superior lui 2 (de exemplu, cubul);

categoria medie — o singură direcție particulară, care coincide cu o axă de simetrie unică de ordinul 3, 4 sau 6, adică mai mare ca 2 (de exemplu, prisma trigonală, prisma tetragonală și prisma hexagonală);

categoria inferioară are cîteva direcții particulare, nu există axe de ordin mai mare decît 2 (de exemplu, așa-numita prismă rombică, ce are trei axe 2).

În categoria superioară sînt incluse cristalele care au cîteva axe de simetrie de ordin superior lui 2; în particular, există obligatoriu patru axe 3 și, în afară de ele, mai pot exista trei axe 4 sau 4. Acestea sînt cristalele cu simetrie superioară. Ele nu au direcții particulare. Într-un cristal din categoria superioară, oricărei direcții îi corespund alte direcții simetric echivalente.

După direcțiile simetrice echivalente, proprietățile cristalului trebuie să fie aceleași, încît anizotropia proprietăților cristalelor din categoria superioară se manifestă cel mai slab. Proprietățile fizice ale cristalelor, exprimate printr-un tensor de rangul doi (v. cap. 3), adică conductibilitatea termică, permitivitatea dielectrică și altele sînt izotrope, izomerice în aceste cristale.

Din categoria medie fac parte cristalele care au o singură direcție singulară, și anume o axă de simetrie 3, 4 sau 6 (simplă sau de inversie). La aceste cristale anizotropia proprietăților fizice se manifestă mult mai categoric decît la cristalele din categoria superioară.

Din categoria inferioară fac parte cristalele care nu au axe de simetrie de ordin mai mare ca 2 și la care există cîteva direcții particulare. Acestea sînt cristalele cele mai puțin simetrice, avînd cea mai puternică anizotropie a proprietăților.

La rîndul lor, cele trei categorii se subîmpart în șapte sisteme după criteriul simetriei caracteristice a lor și după combinațiile dintre axele de simetrie (v. § 3).

Categoria inferioară se împarte în trei sisteme* :

sistemul *triclinic* („cu trei înclinări”) — nu există nici axe, nici planuri de simetrie ;

sistemul *monoclinic* („uniinclinat”) — există numai o singură axă de simetrie de ordinul doi, sau un singur plan de simetrie, sau și o axă și un plan ;

sistemul *rombic* — cristalul are mai mult de o axă de ordinul doi sau mai mult de un plan de simetrie.

Categoria medie se subdivide tot în trei sisteme :

sistemul *trigonal* — o singură axă principală de simetrie 3 sau $\bar{3}$;

sistemul *tetragonal* — „ „ „ „ „ „ 4 sau $\bar{4}$;

sistemul *hexagonal* — „ „ „ „ „ „ 6 sau $\bar{6}$.

Categoria superioară constă dintr-un singur sistem — sistemul *cubic* — care se caracterizează prin existența a patru axe de simetrie de ordinul trei.

În loc de împărțirea categoriilor în șapte sisteme, ele se pot împărți în șase singonii.

Noțiunea de singonie coincide cu noțiunea de sistem pentru toate sistemele, în afară de sistemele trigonal și hexagonal. Împărțirea în singonii determină alegerea sistemului de coordonate

* Termenii cristalografici sînt formați, în cea mai mare parte, din cîteva cuvinte grecești: mono — 1, di — 2, tri — 3, tetra — 4, penta — 5, hexa — 6, hepta — 7, octo — 8, deca — 10, dodeca — 12, edra — față, gonă — unghi, pinax — placă, clino — înclinație, scalena — oblic, strîmb, trapezion — masă, sin — asemănător.

Împărșirea cristalelor în categorii, singonii și sisteme

Categoria	Numărul de direcții unice	Singonia	Sistemul	Simetria caracteristică	Forma celulei elementare	Axele de coordonate	Distribuția aleasă pentru axe	Parametrii care caracterizează substanța
Inferioară	Câteva	Triclinică	Triclinic	Nu există	Paralelipiped oblic	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	După muchiile cristalului, $c < b < a$	$a : b : c$ α, β, γ
		Monoclinică	Monoclinic	Axă 2 sau plan de simetrie	Prismă dreaptă cu paralelograme la bază	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \neq \gamma$	1. Axa Y, paralelă cu axa 2 sau normală la planul m 2. Axă Z paralelă cu axa 2 sau normală la planul m $c < b < a$	$a : b : c, \gamma$
	Una	Rombică	Rombic	Trei axe 2 sau trei planuri de simetrie	Paralelipiped drept	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Axe paralele cu 2 sau normale la m, $c < b < a$	$a : b : c$
		Hexagonală	Hexagonal Trigonal *	Axă 6 sau $\bar{6}$ Axă 3 sau $\bar{3}$	Prismă cu baza sub formă de romb cu unghiul de 120°	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	Axa principală paralelă cu Z, celelalte în planul XY	$c : a$
Superioară	Nu există	Tetragonală	Tetragonal	Axă 4 sau $\bar{4}$	Prismă cu baza pătrat	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
		Cubică	Cubic	Patru axe 3	Cub	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Axe paralele cu cele trei axe 4 (sau $\bar{4}$, sau 2)	a

* În forma rombică: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Celula elementară este un romboedru. Parametrul caracteristic al substanței: a, α .

cristalografic și a tripletului de vectori ai bazei, care-l caracterizează, a_1 , a_2 , a_3 sau, altfel spus, alegerea metricii, a , b , c , α , β , γ (v. fig. 1.7).

Axele de coordonate cristalografice se aleg totdeauna după axele de simetrie sau după normalele la planurile de simetrie. Dacă nu există elemente de simetrie corespunzătoare, ca în singoniile monoclinică și triclinică, axele de coordonate se aleg după muchiile poliedrului cristalin sau după șirurile rețelei cristaline.

Celulele elementare primitive, care corespund fiecărei singonii sînt date în prima coloană a tabelului 9.1 și sînt cuprinse în tabelul 4.1.

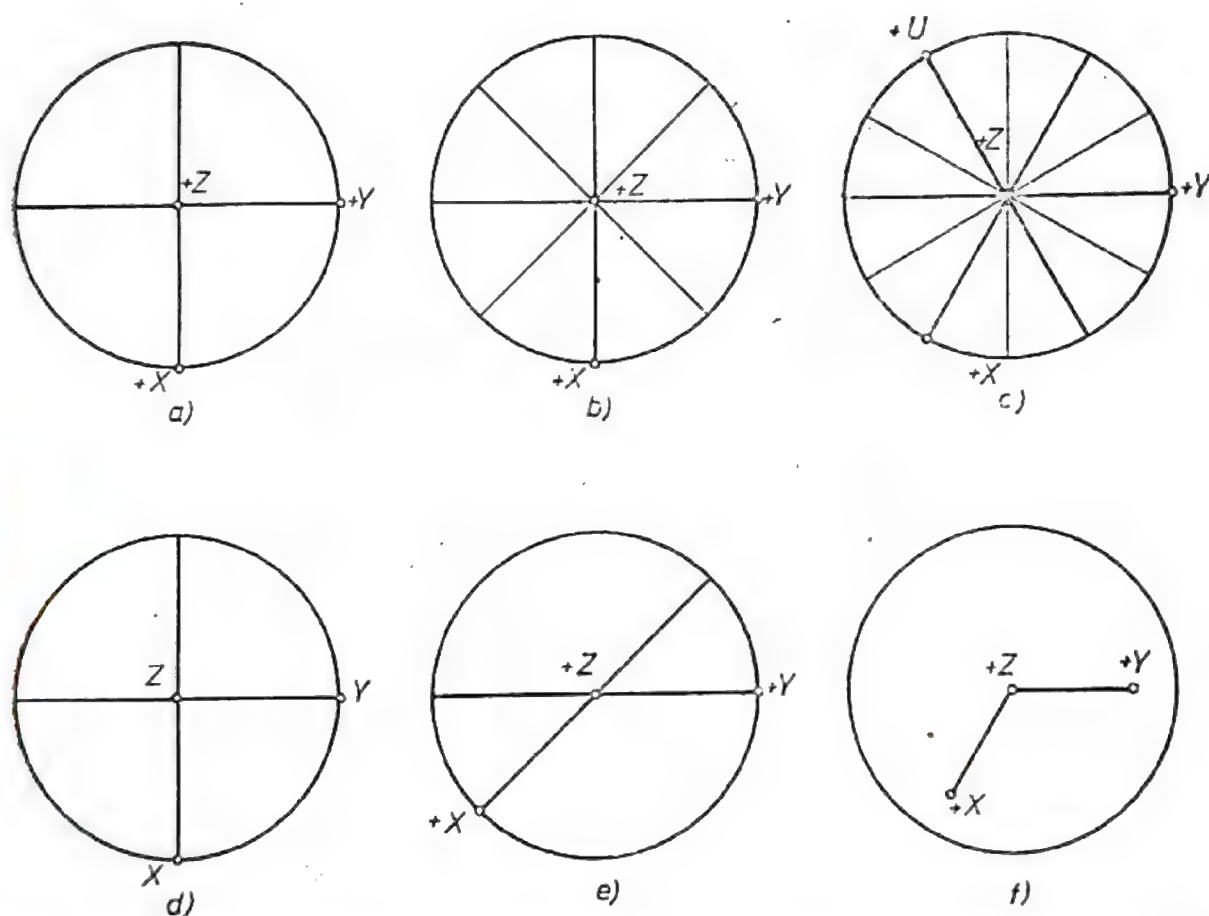


Fig. 4.1. Regulile de aranjare cristalografică a unui sistem (proiecție stereografică): cubic (a), tetragonal (b), trigonal și hexagonal (c), rombic (d), monoclinic (e) și triclinic (f).

În figura 4.1 se arată cum se aleg axele de coordonate în cristalele din cele șapte sisteme.

În categoria superioară se află o singură singonie, cea cubică. Aceasta este unica singonie, astfel încît simetriei sale îi corespunde sistemul de coordonate cartezian obișnuit, $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Celula elementară este un cub. Drept axe de coordonate

se iau trei axe 4, sau $\bar{4}$, sau 2, rectangulare. Apoi cristalele din singonia cubică au obligatoriu patru axe 3 (diagonalele cubului); acest fapt este cel mai caracteristic semn al cristalelor cubice. Noțiunile de sistem cubic și singonie cubică coincid.

În categoria medie intră două singonii :

singonia *tetragonală* — axă principală 4 sau $\bar{4}$;

singonia *hexagonală* — axă principală 6, sau $\bar{6}$, sau 3, sau $\bar{3}$.

În aceste singonii, totdeauna ca axă principală se alege axa Z (X_3), axele X (X_1) și Y (X_2) găsindu-se în planul perpendicular pe axa principală. Segmentele de pe axele X și Y sînt aici egale ($a = b$); de aceea, metrica cristalelor din categoria medie se caracterizează prin raportul c/a ; acest raport este diferit pentru substanțe diferite, el fiind o constantă caracteristică substanței.

Pentru cristalele tetragonale noțiunile de sistem și de singonie coincid. În ceea ce privește cristalele din sistemele* hexagonal și trigonal, ele pot fi descrise într-un singur sistem de coordonate, așa-numitul sistem hexagonal de coordonate; unica axă 3, sau $\bar{3}$ (trigonală) sau 6, sau $\bar{6}$ (hexagonală) se ia drept axă Z. Axele X și Y se află într-un plan perpendicular pe axa Z, făcînd între ele un unghi de 120° ; pentru simetrie se mai adaugă la ele o a patra axă, U, în același plan și tot la 120° , adică se utilizează un sistem cu patru axe de coordonate. Celula elementară a acestei singonii este compusă din trei celule primitive (v. tab. 9.1).

Pentru reprezentarea acestor cristale se poate utiliza și un sistem de coordonate cu trei axe (romboedric), ale cărui axe sînt paralele cu muchiile unui romboedru elementar (v. § 9).

În singonia rombică (ortorombică) ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) se utilizează un sistem de coordonate rectangular cu segmente inegale, fiind obligatorie condiția $c < a < b$. Axele de coordonate se iau după axele 2 sau perpendiculare la planul de simetrie.

În singonia monoclinică $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$, axa Y fiind paralelă cu axa 2 sau perpendiculară la m , axele X și Z se află în planul normal la Y, dar atît dispunerea lor cît și unghiul dintre ele nu sînt date prin elementele de simetrie; ele se aleg după șirurile de atomi din structura cristalului sau după muchiile formei exterioare a cristalelor. Este posibilă și o altă

* Din nefericire, între noțiunile de singonie și sistem nu se face o distincție netă în literatură. Uneori sistemul trigonal este considerat ca un subsistem al sistemului hexagonal, alteori se confundă noțiunea de sistem cu noțiunea de singonie și atunci se vorbește despre șapte singonii, printre care singonia hexagonală și singonia trigonală. În toate cazurile este vorba nu despre diferențe principale, ci doar despre o terminologie insuficient de precisă.

dispunere a axelor — așa-numita a doua dispunere a singoniei monoclinice, când axa 2 sau normala la m este paralelă cu axa Z .

În sistemul triclinic ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$) nici o axă nu este dată prin elemente de simetrie, ci axele se aleg după muchiile cristalului, cu condiția obligatorie $c < a < b$.

Pentru categoria inferioară noțiunile de singonie și sistem coincid.

Împărțirea cristalelor pe categorii, sisteme și singonii este cuprinsă în tabelul 4.1. Menționăm că în cristalografie sînt extrem de importante regulile de aranjare, adică dispunerea elementelor de simetrie după anumite axe de coordonate, deoarece de aceasta depinde univocitatea indexării.

§ 5. GRUPURI (CLASE) PUNCTUALE DE SIMETRIE A CRISTALELOR

Mulțimea operațiilor de simetrie ale unui poliedru cristalin ideal, adică a transformărilor în urma aplicării cărora acest poliedru coincide cu el însuși, formează o *clasă* (specie) *de simetrie* sau un *grup punctual de simetrie a cristalului*. Numărul de operații de simetrie distincte pe care le cuprinde grupul poartă numele de *ordinul grupului*.

Să examinăm cele mai simple proprietăți ale unor astfel de grupuri.

Dacă o anumită operație transformă poliedrul cristalin în el însuși, poliedrul se va transforma în el însuși, evident, și prin repetări ale acestei operații. Deoarece rezultatul repetărilor succesive ale unei operații de simetrie se notează ca exponent al acestei operații, într-un grup intră, împreună cu orice operație, și toate puterile ei posibile. Acest fapt nu înseamnă că asemenea puteri sînt oricît de multe: repetarea oricărei operații de simetrie cristalografică punctuală aduce pînă la urmă cristalul în poziție inițială, adică o anumită putere a unei asemenea operații este egală cu identitatea

$$\bar{1}^2 = 1, \bar{m}^2 = 1, \bar{2}^2 = 1, \bar{3}^3 = 1,$$

$$\bar{4}^2 = 1, \bar{6}^6 = 1, \bar{3}^6 = 1, \bar{4}^4 = 1,$$

$$\bar{6}^6 = 1.$$

Grupurile generate de un singur element de simetrie, adică cele care constau din puterile unei aceleiași operații, se numesc

grupuri *ciclice*. Grupurile ciclice cristalografice se notează cu simbolurile elementelor de simetrie care le-au generat. Ele pot fi de ordinul unu, 1, de ordinul doi, $\bar{1}$, m , 2, de ordinul trei, 3, de ordinul patru, 4, $\bar{4}$, de ordinul șase, 6, $\bar{3}$, $\bar{6}$.

Dacă o anumită operație aduce un poliedru în coincidență cu el însuși, fiind deci o operație de simetrie, atunci și o operație care îl aduce în poziția inițială va fi tot o operație de simetrie; ea se numește operație *inversă* celei inițiale (operația inițială fiind, la rîndul ei, inversă față de operația inversă). Operația inversă se notează ca puterea minus unu a operației inițiale.

Produsul dintre operații reciproc inverse este identitatea, 1; evident, orice pereche de operații al căror produs este identitatea sînt inverse una în raport cu alta. Exemple de operații inverse una față de alta :

$$\begin{aligned}\bar{1} \cdot \bar{1} &= 1, & m \cdot m &= 1, & 2 \cdot 2 &= 1, & 3^2 \cdot 3 &= 1, \\ 4^3 \cdot 4 &= 1, & 6^5 \cdot 6 &= 1, & \bar{3} \cdot \bar{3}^5 &= 1, & \bar{4} \cdot \bar{4}^3 &= 1, \\ \bar{6} \cdot \bar{6}^5 &= 1.\end{aligned}$$

După cum se vede, unele operații ($\bar{1}$, m , 2) sînt inversele lor.

Dacă fiecare dintre două operații date transformă un poliedru cristalin în el însuși, atunci poliedrul se va transforma în el însuși și prin aplicarea succesivă a ambelor operații : împreună cu oricare pereche de operații, într-un grup intră și produsul lor (sau ambele produse, dacă ele nu coincid).

Fie ca printre operațiile de simetrie ale unui anumit poliedru cristalin să intre, de exemplu, 2_y și m_y . Conform teoremei 1, § 3, o operație de simetrie va fi și $\bar{1}$. Împreună cu identitatea, aceste operații formează un grup, deoarece toate înmulțirile posibile dintre ele nu conduc la nici un fel de operații diferite de ele; simbolul acestui grup, $2/m$, va fi explicat în paragraful următor. Tabla înmulțirii grupurilor punctuale $2/m$, 222 , $mm2$ și a grupului neciclic abstract de ordinul patru arată astfel :

$2/m$	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
1	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
2_y	2_y	1	$\bar{1}$	m_y
m_y	m_y	$\bar{1}$	1	2_y
$\bar{1}$	$\bar{1}$	m_y	2_y	1

222	1	2_x	2_y	2_z
1	1	2_x	2_y	2_z
2_x	2_x	1	2_z	2_y
2_y	2_y	2_z	1	2_x
2_z	2_z	2_y	2_x	1

$mm2$	1	m_x	m_y	2_z
1	1	m_x	m_y	2_z
m_x	m_x	1	2_z	m_y
m_y	m_y	2_z	1	m_x
2_z	2_z	m_y	m_x	1

abstr.	1	a	b	c
1	1	a	b	c
a	a	1	c	b
b	b	c	1	a
c	c	b	a	1

Toate produsele din grupul $2/m$ sînt comutative, adică nu depind de ordinea factorilor; aceasta rezultă din faptul că tabla înmulțirii grupului este simetrică față de diagonala principală. Astfel, $2/m$ este un grup comutativ. Evident, toate grupurile ciclice sînt comutative (dar nu toate grupurile comutative sînt ciclice).

Grupurile în care nu toate produsele sînt comutative se numesc grupuri *necomutative*. Așa este, spre exemplu, grupul simetriei cristalelor de cuarț, 32, generat de axa 3 și axa perpendiculară pe ea, 2. În § 3 s-a arătat că $3_z 2_x \neq 2_x 3_z$. Tabla înmulțirii acestui grup nu este simetrică față de diagonala principală (v. § 3).

Grupul 32 este un exemplu de grup generat de două operații de simetrie. Din astfel de grupuri fac parte și grupurile de simetrie ale piramidei triunghiulare regulate, $3m$, și ale piramidei tetraedrice regulate, $4m$. Unele grupuri cristalografice iau naștere în urma a trei operații; astfel este, de pildă, grupul de simetrie al piramidei tetraedrice, $4/mmm$. Operațiile care generează un grup se numesc uneori *generatoarele grupului*. Generatoarele tuturor grupurilor cristalografice sînt cuprinse în tabelul 45.2.

Se poate întîmpla ca o parte dintre operațiile care intră într-un grup să formeze ele însele un grup (se înțelege, de ordin inferior celui al grupului inițial); acest grup se numește *subgrup* în raport cu cel inițial, pe cînd grupul inițial este numit *supragrup* în raport cu subgrupul.

Astfel, grupul $2/m$ are trei subgrupuri (între acolade sînt trecute operațiile care intră în grup): $2\{1, 2_y\}$, $m\{1, m_y\}$ și $\bar{1}\{1, \bar{1}\}$, iar grupul 32 are patru subgrupuri: $3\{1, 3_z, 3_z^2\}$, $2\{1, 2_x\}$, $2\{1, 2_y\}$, $2\{1, 2_z\}$. Faptul că grupul $\bar{1}$ este un subgrup al grupului $2/m$ se notează în felul următor: $\bar{1} \subset 2/m$. Grupul 1 constînd din unica operație 1, este subgrup al oricărui grup, așa că adesea el se numește *subgrupul banal* și se omite la scrierea grupului.

Raportul dintre ordinul grupului și ordinul subgrupului se numește *indice al subgrupului*; astfel, în raport cu grupul 32, grupul 3 este un subgrup cu indicele 2, iar grupul 2, un subgrup cu indicele 3; față de grupul $2/m$, grupurile 2, m și $\bar{1}$ sînt subgrupuri cu indicele 2.

Ansamblul tuturor operațiilor care intră concomitent în două grupuri se numește *intersecția* acestor grupuri. Nu este greu de

demonstrat că intersecția a două grupuri este tot un grup; de aici rezultă că intersecția a două grupuri este cel mai general subgrup al acestor grupuri. La aflarea intersecției a două grupuri punctuale trebuie să ținem seama de poziția reciprocă a elementelor de simetrie din ele. Astfel, dacă grupurile 32 și $2/m$, examinate anterior, sînt raportate la același sistem de coordonate, atunci intersecția acestor grupuri va fi grupul $2\{1, 2_y\}$. Notăția corespunzătoare este $32 \cap 2/m = 2$, sau, dacă vrem să subliniem orientarea elementelor de simetrie, $3_2 2_y \cap 2_y/m_y = 2_y$.

Grupurile punctuale de simetrie a cristalelor constituie una dintre realizările posibile ale grupurilor matematice. În matematică *grupul* este mulțimea G de elemente a, b, c, \dots (faptul că a este un element ce aparține mulțimii G se notează $a \in G$) care se supune următoarelor axiome:

1) pentru oricare două elemente (nu neapărat diferite) ale grupului $a \in G$ și $b \in G$, luate într-o anumită ordine, există un singur element, $c \in G$, numit *produsul* lor: $c = ab$;

2) pentru toate elementele grupului este satisfăcută legea asociativității: $a(bc) = (ab)c$;

3) într-un grup există *elementul unitate*, $1 \in G$, astfel încît prin înmulțirea lui la dreapta sau la stînga cu orice element $a \in G$, acesta va rămîne neschimbat: $a1 = 1a = a$;

4) pentru orice element $a \in G$ există *elementul invers*, $a^{-1} \in G$, astfel încît $a^{-1}a = aa^{-1} = 1$.

Comparînd aceste axiome cu proprietățile grupurilor punctuale, examinate mai sus, vedem că grupurile punctuale se supun axiomelor enumerate, fiind astfel un caz particular al grupurilor matematice.

Dacă grupul are numai proprietățile enumerate în axiome, atunci el se numește grup *abstract*. Un grup abstract este complet determinat dacă este dată tabla înmulțirii lui.

Grupurile punctuale au, în afară de proprietățile enumerate în axiome, și alte nenumărate proprietăți: ele pot fi centrosimetrice sau necentrate, holodrice și meroedrice, fiecare dintre ele aparținînd uneia sau alteia dintre categorii, sisteme, singonii etc. (aceste proprietăți ale lor vor fi examinate în § 14).

Grupurile punctuale cristalografic diferite pot fi abstract identice, adică să aibă aceleași table de înmulțire (Belova, Belov, Šubnikov, 1948). Astfel de grupuri punctuale se numesc grupuri *izomorfe*. Tuturor grupurilor punctuale, cristalografic diferite, dar izomorfe între ele, le corespunde unul și același grup abstract; astfel sînt, de exemplu, grupurile comutative $2/m$, 222 și $mm2$. De altfel, grupurile izomorfe sînt date în figura 14.5.

Pentru notarea claselor (a grupurilor punctuale) cristalografice de simetrie se utilizează simboluri care au la bază terminologia de la înmulțirea operațiilor de simetrie.

În notarea internațională sint acceptate următoarele simboluri : n — axă de simetrie de ordinul n ($n = 2, 3, 4, 6$) (de fapt, în codul internațional această axă se notează cu X sau cu X_n ; noi am înlocuit această notație cu simbolul n , deoarece cu X notăm peste tot prima axă de coordonate), \bar{n} — axă de simetrie de inversie, de ordinul n , m — plan de simetrie, nm — axă de simetrie de ordinul n și m planuri de simetrie ce trec prin ea (vezi teorema 4, § 3), $\frac{n}{m}$, n/m — axă de simetrie de ordinul n și

plan de simetrie perpendicular pe ea ; dacă n este par, atunci, conform teoremei 3, mai există și un centru de simetrie ; $n2$ — axă de simetrie de ordinul n și n axe de ordinul 2, perpendiculare pe ea (vezi teorema 1) ; $\frac{n}{m}m$, sau n/mmm — axă de simetrie de

ordinul n și planuri paralele și perpendiculare față de ea. În simbolul internațional al clasei de simetrie se notează numai elementele generatoare ale simetriei — planurile sau axele ; cunoscând teoremele relative la combinația elementelor de simetrie, se poate reprezenta întreaga mulțime de elemente de simetrie ale unei anumite clase ; o importanță deosebită o are ordinea de scriere :

Tabelul 5.1

Ordinea pozițiilor în simbolurile grupurilor punctuale

Singonia	Poziția în simbol		
	I	II	III
Triclinică	Un singur simbol care corespunde oricărei direcții din cristal		
Monoclinică	O axă 2 sau normala la m , paralelă cu axa X_2 (prima structură) sau paralelă cu axa X_3 (a doua structură)		
Rombică	O axă 2 sau normala la m paralelă cu		
	axa X_1	axa X_2	axa X_3
Hexagonală * Tetragonală	Axă principală de simetrie	Axe 2 sau normale la m după direcțiile coordonatelor	
			direcțiile diagonalelor
Cubică	Elementele de simetrie ale coordonatelor	3	Elementele de simetrie diagonale

* În structura romboedrică, axa principală este după $\langle 111 \rangle$, axele 2 sau normalele la planuri sint paralele cu trei direcții $\langle 110 \rangle$ și cu trei $\langle 112 \rangle$. Aici parantezele în unghi desemnează totalitatea direcțiilor (v. §12).

sensul unei cifre sau al unei litere, care înseamnă un element de simetrie, depinde de poziția în care este scris în reprezentare. Regulile de scriere a simbolurilor internaționale ale grupurilor punctuale sînt sintetizate în tabelul 5.1. În cadrul notării se impune respectarea strictă a regulilor edificiului cristalografic (v. fig. 4.1.).

În notarea internațională se deosebesc elementele de simetrie „de coordonate” și „diagonale”; planurile sau axele de coordonate sînt paralele cu planurile de coordonate, iar cele diagonale sînt paralele cu bisectoarele unghiurilor dintre ele. Utilitatea unei asemenea subîmpărțiri și diferențieri ierarhice între elementele de simetrie, de coordonate și diagonale, vor deveni clare în cadrul analizei simetriei microscopice a cristalelor (§ 9).

Dintre simbolurile tuturor claselor categoriei medii, pe primul loc se află axa principală de simetrie, care este după axa Z , pe al doilea, elementele de simetrie de coordonate din planul XY , pe al treilea, elementele de simetrie diagonale din același plan. De exemplu, simbolul $4mm$ desemnează: existența axei 4_z , a două planuri de coordonate de simetrie și două planuri de simetrie, care conțin axa 4_z și bisectoarele unghiurilor dintre axele X și Y . Acest simbol se poate scrie și prescurtat: $4mm \equiv 4m$, deoarece din teorema 4 rezultă clar că dacă există un singur plan m după axa 4, atunci vor exista în total patru astfel de planuri.

Cifra 3 din simbolul internațional al unui grup punctual, pentru cristalele din categoria superioară (singonia cubică), pe locul al doilea, desemnează convențional existența a patru axe 3, spre deosebire de cifra 3 pe locul întâi, care desemnează existența unei singure axe particulare — axa 3 — pentru cristalele din sistemul trigonal. Existența a patru axe 3, care trec după bisectoarele unghiurilor de coordonate, este caracteristică pentru toate clasele sistemului cubic. Axele de simetrie 4, dacă există, coincid totdeauna cu axele de coordonate. Axele de simetrie 2 și planurile pot fi de coordonate sau diagonale. Dacă numărul de axe de simetrie 2 sau de planuri m este egal cu trei, atunci aceste elemente sînt de coordonate, dacă numărul lor este de șase, atunci ele sînt diagonale. În sfîrșit, dacă sînt nouă, atunci trei dintre ele sînt de coordonate, iar șase diagonale. Drept elemente de simetrie de coordonate și diagonale se scriu, de preferință, planurile, iar axele de simetrie sînt incluse în simbol numai dacă nu există planuri.

De exemplu, simbolul $m\bar{3}$ se descifrează în modul următor: patru axe 3, după bisectoarele unghiurilor de coordonate, și trei planuri de simetrie, de coordonate; conform teoremei 2, la intersecțiile planurilor vor apărea trei axe 2, iar conform teoremei 3, la intersecția lor se adaugă centrul. Să comparăm simbolul $3m$

cu simbolul $m3$: cifra 3, care este pe primul loc, înseamnă o singură axă principală de simetrie, de ordinul trei, adică apartenența la sistemul trigonal ; litera m , care urmează după această cifră, înseamnă trei planuri de simetrie, care trec prin axă (conținând-o). Din acest exemplu se vede că permutarea cifrelor sau literelor într-un simbol dintr-o poziție în alta schimbă complet sensul simbolului.

În simbolistica „didactică” (simbolistica Bravais) se utilizează notațiile : plan de simetrie, P , centru de simetrie, C , axe de simetrie, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6 , axe de simetrie de inversie, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6 sau $L_{11}, L_{12}, L_{13}, L_{14}, L_{16}$. În formula unei clase de simetrie se scriu în ordine toate elementele de simetrie — întâi axele, începînd cu ordinul cel mai mare, apoi planurile, apoi centrul. Astfel, de exemplu, simbolul $L_6 7PC$ înseamnă : o axă L_6 , șapte planuri de simetrie, un centru de simetrie. Conform teoremei 4, după axa L_6 pot trece numai șase planuri, cel de al șaptelea plan de simetrie trebuind să se deosebească de celelalte șase prin dispunerea lui ; existența centrului de simetrie, $C(\bar{1})$, înseamnă, conform teoremei 3a, că acest plan este perpendicular pe axa L_6 (6). Analog se citesc celelalte formule de simetrie.

În simbolistica Schoenflies se utilizează următoarele notații : C_n — o singură axă de simetrie de ordinul n , D_n — o singură axă de simetrie de ordinul n și n axe 2, perpendiculare pe ea. Axa unică se consideră totdeauna verticală, adică axa Z . Dacă există mai multe axe, atunci se consideră axă verticală cea de ordinul cel mai mare. Indicii v , h și d reprezintă planurile de simetrie adăugate axei verticale respective : v — verticale, h — orizontale, d — diagonale, iar T — axele de simetrie ale tetraedrului cubic și O — axele de simetrie ale octaedrului cubic.

Prin urmare, C_n înseamnă o singură axă verticală, polară, de ordinul n , C_{nv} — o singură axă polară verticală de ordinul n și n planuri de simetrie ce trec prin ea, C_{nh} — o singură axă n și un plan de simetrie perpendicular pe ea, D_n — o singură axă verticală de ordinul n și n axe 2, perpendiculare pe ea, D_{nh} — o singură axă verticală de ordinul n și un plan de simetrie perpendicular pe ea ; S_n — o singură axă verticală de rotație-ogîndire de ordinul n (uneori se utilizează notația C_{ni} , unde i este semnul axei de inversie : $S(S_{(1)}) = \bar{2}$, $S_2 = C_i = \bar{1}$, $S_3 = C_{3h} = 6$, $S_4 = 4$, $S_6 = C_{6i} = \bar{3}$), S_n — o singură axă de inversie verticală de ordinul n ; $V = D_2$ — o combinație de trei axe de ordinul doi, perpendiculare între ele, $V_h = D_{2h}$ — trei axe doi, reciproc perpendiculare și planurile perpendiculare pe fiecare dintre aceste axe ; $V_d = D_{2d}$ — trei axe 2 reciproc perpendiculare și planurile diagonale ; T — axele de simetrie ale tetraedrului, T_d — axele de simetrie ale tetrae-

drului și planurile diagonale, T_h — axe de simetrie ale tetraedrului și planurile de coordonate; O — axe de simetrie ale octaedrului; O_h — axe de simetrie ale octaedrului și planurile de coordonate.

Existența unor elemente de simetrie ce nu sînt indicate în simbol rezultă din teoremele asupra compunerii.

Sistemul de notații cristalografice, propus de A. V. Șubnikov, utilizat în multe cărți și reviste sovietice, are aceeași logică internă ca și sistemul internațional, deosebindu-se însă întrucîtva de ultimul prin notațiile sale. După Șubnikov, axele și planurile se notează la fel ca în sistemul internațional. Perpendicularitatea nu se notează prin linie de fracție, ci prin două puncte, iar paralelismul printr-un punct. Linia oblică, care separă două denumiri ale axelor, înseamnă că aceste axe formează între ele un unghi. În afară de aceasta, liniuța de deasupra simbolului axei înseamnă că această axă este axă de oglindire, spre deosebire de simbolul internațional, la care aceeași liniuță înseamnă o axă de inversie.

Prin urmare, simbolul $\bar{3}$ are, după Șubnikov, aceeași semnificație cu simbolul $\bar{6}$ din sistemul internațional și invers, simbolul $\bar{6}$ șubnikovian corespunde simbolului $\bar{3}$ internațional. Uneori, pentru a evita ambiguitățile, axa de oglindire din simbolistica Șubnikov se notează cu o tremă. Celelalte diferențe din simbolistica Șubnikov se pot lămurii din tabelul 6.1.

§ 6. DEDUCEREA ȘI DESCRIEREA CELOR 32 DE CLASE DE SIMETRIE ALE CRISTALELOR (CELORE 32 GRUPURI PUNCTUALE DE SIMETRIE)

Pentru a deduce cele 32 de clase de simetrie este necesar să reexaminăm toate combinațiile posibile ale elementelor de simetrie cristalografice, care se intersectează într-un punct. Pentru aceasta să luăm un element de simetrie generator, inițial, oarecare și să îi adăugăm pe rînd toate celelalte elemente de simetrie rămase, drept elemente de simetrie generatoare. Pe baza teoremelor din § 10, din combinațiile a două elemente de simetrie generatoare se deduc elementele de simetrie generate.

Să începem cu cristalele în care există direcții particulare, adică cu cele din categoriile inferioară și medie. Vom lua drept element de simetrie generator o axă de simetrie de-a lungul direcției particulare și vom adăuga la ea celelalte elemente de simetrie, așa cum se vede în figura 6.1. Planurile de simetrie pot trece fie după axa de simetrie aleasă, fie normal la ea, dat fiind că în orice altă configurație axa de simetrie, oglindindu-se în planul de simetrie

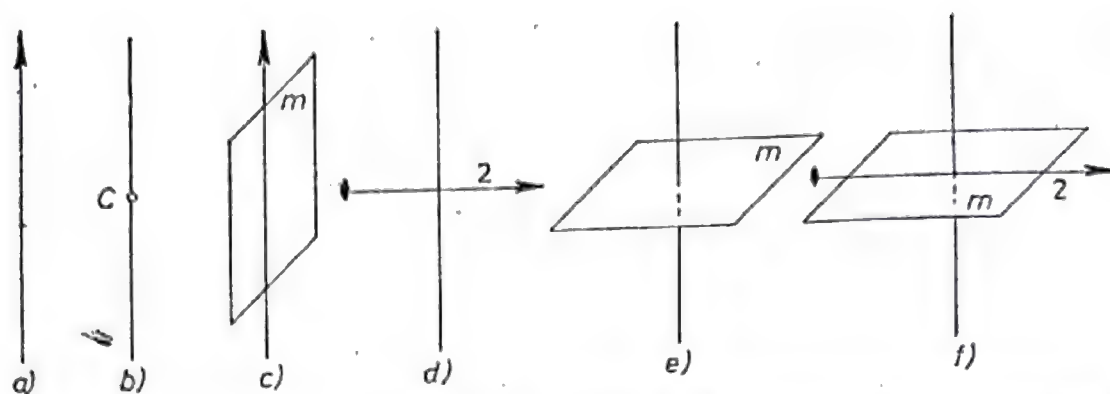


Fig. 6.1. Scheme pentru deducerea claselor de simetrie ale categoriilor inferioară și medie.

trie, se va repeta, adică nu va fi unică. Din aceeași cauză, axe 2 pot fi numai perpendiculare la axa aleasă; în categoriile inferioară și medie nu pot exista alte axe. Centrul de simetrie se poate găsi numai pe axa aleasă. Prin urmare, în cristalele de categorie inferioară sau medie nu pot exista alte combinații în afară de cele indicate în figura 6.1.

Clasele de simetrie *simple* sau *primitive* sînt acele clase în care există doar un singur element de simetrie și anume o axă de rotație de ordinul n , de-a lungul direcției particulare (fig. 6.1, a).

Adăugînd fiecăreia dintre axe un centru de simetrie și aplicînd teorema 3, obținem clasele centrate (fig. 6.1, b) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Elementul generat	—	m	—	m	m
Clasa de simetrie	1	$2/m$	$\bar{3}$	$4/m$	$6/m$.

Adăugarea centrului de simetrie la o axă 3 a convertit-o într-o axă de inversie, $\bar{3}$. Uneori, clasa $\bar{3}$ nu este considerată clasă centrală, ci o clasă primitivă de inversie (v. tabelele 6.1. și 6.2).

Adăugînd axei de simetrie generatoare planul de simetrie, care trece prin ea, obținem, pe baza teoremei 4, după schema $m \cdot n = nm$ clasele planare (fig. 6.1, c) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	m	$mm2$	$3m$	$4mm$	$6mm$

Sensul scrierii simbolurilor $4mm$ și $6mm$ este explicat mai sus : pe locul al doilea se află elementele de simetrie de coordonate, iar pe locul al treilea cele diagonale. Clasa $mm2$ face parte din singonia rombică, în care, după regulile structurii cristalografice, axa 2 (dacă este unică) trebuie să fie o axă 2_z , ceea ce înseamnă că ea trebuie să fie scrisă pe locul al treilea în simbol.

Dacă se adaugă axa 2, perpendiculară pe axa generatoare, obținem, conform teoremei 1, *clasele axiale* (fig. 6.1, d) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	$\underline{2}$	222	32	422	622

Clasa 2 este încadrată într-un chenar pentru a arăta că această combinație a fost deja dedusă mai sus. În simbolurile 422, 622, în poziția a doua se află axele 2, care sînt după direcțiile de coordonate, iar în poziția a treia — după direcțiile diagonale.

Adăugînd axei generatoare planul de simetrie perpendicular (fig. 6.1, e), obținem, conform teoremei 2a, clasele enumerate deja mai sus :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	\underline{m}	$\underline{2/m}$	$\underline{3}$	$\underline{4/m}$	$\underline{6/m}$

Dacă axei de simetrie generatoare i se adaugă centrul, o axă 2 și un plan longitudinal, m , atunci vom obține, conform teoremelor 3 și 4, *clasele planaxiale* (fig. 6.1, f) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	$\underline{2/m}$	mmm	$\bar{3}m$	$4/mmm$	$6/mmm$

Clasele enumerate epuizează combinațiile elementelor de simetrie cu axă generatoare de simetrie de rotație.

Să ne referim acum la axele de simetrie de inversie. Axele $\bar{1}$, $\bar{2} \equiv m$, $\bar{3}$ și $\bar{6}$ au fost trecute deja în revistă. A rămas numai axa $\bar{4}$, care, ca și axele $\bar{3}$ și $\bar{6}$, dă axe primitive de inversie

$$\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}.$$

Clasele planare de inversie

$$\bar{4}2m \text{ și } \bar{6}m2$$

se obțin dacă axei de inversie generatoare i se adaugă un plan de simetrie care trece de-a lungul axei.

Mai întii vom observa că orice axă de simetrie de inversie de ordinul $2n$ este totodată și o axă de simetrie simplă de ordinul n . Prin urmare, conform teoremei 4, dacă printr-o axă $\bar{2n}$ trece un plan de simetrie, atunci trebuie să existe n asemenea planuri. Combinației de elemente de simetrie astfel apărute i se aplică o nouă teoremă (numărătoarea teoremelor o continuă pe cea din § 3).

T e o r e m a 6. Dacă după o axă de inversie pară, trec diferite planuri de simetrie, atunci între ele se vor dispune axele de simetrie de ordinul doi.

Tabelul 6.1

Cele 32 clase de simetrie, notațiile și denumirile

Nr. crt.	Simbolul internațional		Formula de simetrie	Simbolul Schoenflies	Simbolul Șubnikov	Denumirea		
	prescurtat	complet				după Institutul „Fedorov”	după Schoenflies	după Groth
Sistemul triclinic								
1	1		L_1	C_1	1	primitivă	hemiedrie	monoedrică
2	1		C	$C_i = S_2$	$\bar{2}$	centrată	holoedrie	pinacoidală
Sistemul monoclinic								
3	2		L_2	C_2	2	axială	hemiedrie	diedrică cu axe
4	m		P	$C_2 = C_{2h}$	m	planară	hemimorfie	domatică
5	$2/m$	$\frac{2}{m}$	L_2PC	C_{2h}	$2 : m$	planaxială	holoedrie	prismatică
Sistemul rombic								
6	222		$3L_2$	$D_2 = V$	$2 : 2$	primitivă	hemiedrie enantiomorfă	rombo-tetraedrică
7	mm	$\frac{2\ mm,}{mm^2}$	L_22P	C_{2v}	$2 \cdot m$	centrată	hemimorfie	rombo-piramidală
8	mmm	$\frac{2\ 2\ 2}{m\ m\ m}$	$3L_23PC$	$D_{2h} = V_h$	$m \cdot 2 : m$	axială	holoedrie	rombo-dipiramidală
Sistemul trigonal								
9	3		L_3	C_3	b	primitivă	tetartoedrie romboedrică	trigonal-piramidală
10	$\bar{3}$		$L_3C = L_{3i}$	$C_{3i} = S_6$	$\bar{6}$	centrată	tetartoedrie hexagonală	romboedrică

Tabelul 6.1 (continuare)

11	32	$L_3^3 L_2$	D_3	3 : 2	axială	hemiedrie enantiomorfă	trigonal- trapezodrică
12	3m	$L_3^3 P$	C_{3v}	3 : m	planară	hemiedrie hemimorfă	ditrigonal- piramidală
13	$\overline{3}m$	$L_3^3 L_2^3 PC$	D_{3d}	$\overline{6} \cdot m$	planaxială	holoedrie romboedrică	ditrigonal- scalenoedrică

Sistemul hexagonal

14	6	L_6	C_6	6	primitivă	tetartoedrie hexagonală	hexagonal- piramidală
15	$\overline{6}$	$L_3^3 P$	C_{3h}	3 : m	primitivă de inversie	hemiedrie para- morfă trigonală	trigonal- dipiramidală
16	$\overline{6}/m$	$L_6^3 PC$	C_{6h}	6 : m	centrată	hemiedrie paramorfă	hexagonal- dipiramidală
17	622	$L_6^6 L_2$	D_6	6 : 2	axială	hemiedrie enantiomorfă	hexagonal- trapezodrică
18	6 mm	$L_6^6 P$	C_{6v}	6 : m	planară	hemiedrie hemimorfă	dihexagonal- dipiramidală
19	$\overline{6} m2$	$L_3^3 L_2^3 AP$	D_{3h}	m : 3 : m	planară de inversie	holoedrie trigonală	ditrigonal- dipiramidală

Tabelul 6.1 (continuare)

Nr. crt.	Simbolul internațional		Formula de simetrie	Simbolul Schoenflies	Simbolul Șubutikov	Denumirea	
	prescurtat	complet				după Institutul „Piodorov”	după Schoenflies
20	6/mmm	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$L_6 6L_2 7PC$	D_{6h}	$m \cdot 6 : m$	planaxială	holoedrie
							dihexagonalodipiramidală

Sistemul tetragonal

21	4		L_4	C_4	4	primitivă	tetartoedrie	tetragonalo-dipiramidală
22	$\bar{4}$		$L_{\bar{4}}, L_{4i}$	$S_{\bar{4}}$	$\bar{4}$	primitivă de inversie	tetartoedrie de specia a doua	tetragonalo-tetradrică
23	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$	$L_4 PC$	C_{4h}	$4 : m$	centrată	hemiedrie paramorfă	tetragonalo-dipiramidală
24	422		$L_4 4L_2$	D_4	$4 : 2$	axială	hemiedrie enantiomorfă	tetragonalo-trapezodrică
25	4mm		$L_4 4P$	C_{4v}	$4 \cdot m$	planară	hemiedrie hemimorfă	ditetragonalo-piramidală
26	42m		$L_4 2L_2 2P$	$D_{2d} = V_d$	$\bar{4} \cdot m$	planară de inversie	hemiedrie de specia a doua	tetragonalo-scalenoedrică
27	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	$L_4 4L_2 5PC$	D_{4h}	$m \cdot 4 : m$	planaxială	holoedrie	ditetragonalo-dipiramidală

Sistemul cubic

28	23	$3L_24L_3$	T_d	$3/2$	primitivă	tetartoedrie paramorfă	tritetaedrică
29	$m\bar{3}$ $2\bar{3}$ m	$3L_24L_33PC$	T_h	$\bar{6}/2$	centrată	hemiedrie	didodecaedrică
30	432	$3L_44L_36L_2$	O	$\bar{3}/4$	axială	hemiedrie enantiomorfă	trioctaedrică
31	$\bar{4}3m$	$3L_44L_36P$	T_d	$\bar{3}/4$	planară	hemiedrie hemimorfă	hexatetraedrică
32	$m\bar{3}m$ $4\bar{3}$ m $2\bar{m}$	$3L_44L_36L_2$ $9PC$	O_h	$\bar{6}/4$	planaxială	holoedrie	hexoctaedrică




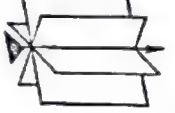
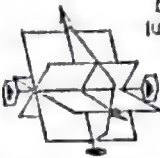
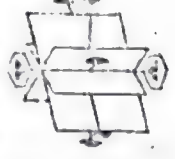








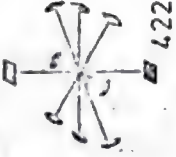








În ceea ce privește denumirile claselor de simetrie, v. și Codarcea (1965, p. 148).

Complexele elementelor de simetrie ale celor 32 de clase

Sistemele	Clasele					
	Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie
Triclinic	1	$\bar{1}$				
Monoclinic				2	m	
						2/m
Rombic				222	m2	
						mmm

Categoria Inferioară

Tabelul 6.2. (continuare)

Clasele									
Sistemele	Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie	Planaxiale		
Categoria medie	Trigonal	 3	 3	 32	 3m	 6m2	 3m		
	Hexagonal	 6	 6/m	 622	 6mm	 6m2	 6/mmm		
	Tetragonal	 4	 4/m	 422	 4mm	 42m	 4/mmm		
Categoria superioara	Cubic	 23	 m3	 32	 23m		 m3m		

Să ilustrăm această teoremă în figura 6.2 pentru axa $\bar{4}$. Fiind dat planul I, aceasta înseamnă că inevitabil apare și un plan II. Cu ajutorul axei $\bar{4}$, transpunem triunghiul A , trecând prin poziția A' , în poziția B , iar cu ajutorul planului II, din B în C . Însă C s-ar fi putut obține din A și printr-o simplă rotație în jurul unei axe 2, luată după bisectoarea unghiului dintre planurile I și II.

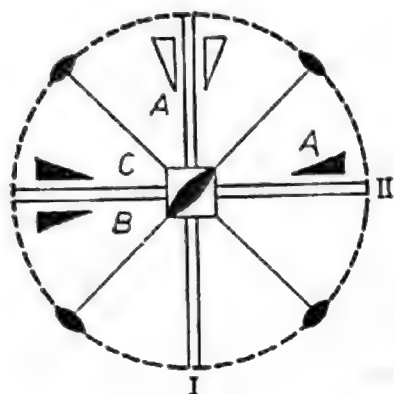


Fig. 6.2. Schemă pentru deducerea clasei de simetrie $\bar{4}2m$.

Astfel, axa $\bar{4}$ și planul longitudinal de simetrie, m , generează un al doilea plan m longitudinal și două axe 2 transversale, după bisectoarele unghiurilor dintre planuri. Combinația completă a elementelor de simetrie are forma $\bar{4}2m$.

Analog, axa de inversie $\bar{6}$ și un plan m , care trece prin ea, generează încă două planuri m longitudinale și trei axe 2 transversale, adică se obține combinația $\bar{6}m2$.

Adăugarea pe rând la axele de simetrie de inversie a planurilor perpendiculare, a axelor 2 și a centrului de inversie nu conduce la nici un fel de combinații noi. Prin urmare, pentru categoriile inferioară și medie se obțin 27 clase de simetrie (v. tab. 6.1).

Să trecem acum la categoria superioară. În cristalele din categoria superioară nu există direcții particulare și pot exista câteva axe de simetrie de ordin mai mare ca 2, care se intersectează într-un singur punct. În § 3 (p. 48) s-a arătat că în acest caz sînt posibile numai două combinații stabile de axe de simetrie: 4, 3, 2 și 3, 3, 2, care corespund axelor de simetrie ale octaedrului (sau cubului) și axelor de simetrie ale tetraedrului (fig. 6.3). Corespunzător, obținem două clase de simetrie ale singoniei cubice: clasa primitivă 23 (axele de simetrie ale tetraedrului) și clasa axială 432 (axele de simetrie ale octaedrului sau cubului).

Celelalte clase din singonia cubică pot fi deduse în același mod în care s-a procedat pentru categoriile inferioară și medie, adică adăugînd succesiv cîte un centru de simetrie sau cîte un

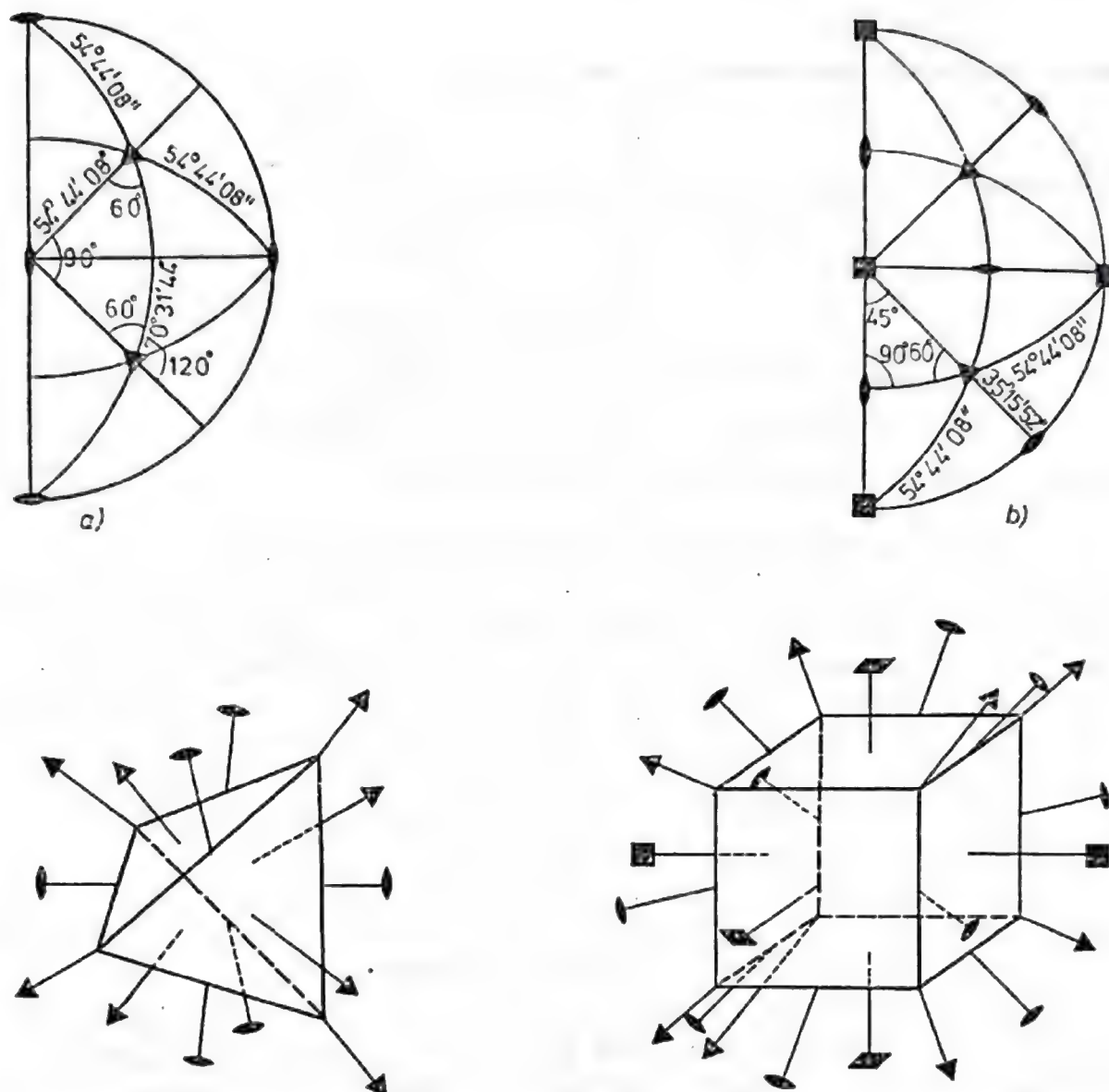


Fig. 6.3. Combinațiile posibile de axe de simetrie în cristalele categoriei superioare : 23 (a) și 432 (b).

plan de simetrie. Axa 2 nu poate fi adăugată aici, deoarece toate combinațiile de axe posibile sînt epuizate.

Planurile pot fi adăugate numai în două feluri : trei planuri de coordonate sau șase planuri diagonale. O altă aranjare a planurilor este imposibilă, dat fiind că la intersecțiile planurilor ar apărea noi axe. Planurile normale la axele pare vor da centrul de simetrie (teorema 2).

Vom ordona toate combinațiile în tabelul de la p. 72.

Astfel, în final obținem, pentru sistemul cubic, cinci clase de simetrie :

$$23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m.$$

Generatoare		Generate	Rezultatul
23	$\bar{1}$	Trei planuri coordonate	$m\bar{3}$
23	m de-a lungul axei 2	$\bar{1}$	$m\bar{3}$
23	m de-a lungul axei 3	Şase planuri diagonale Axa 2 se transformă în axă $\bar{4}$	$4\bar{3}m$
432	$\bar{1}$	Trei planuri de coordonate	$m\bar{3}m$
432	m de-a lungul axei 4	Şase planuri diagonale Centru de simetrie	$m\bar{3}m$
432	m de-a lungul axei 3	Şase planuri diagonale Trei planuri de coordonate Centru de simetrie	$m\bar{3}m$

Sinteza completă a celor 32 de clase de simetrie și repartizarea lor după sisteme este dată în tabelul 6.1, iar în tabelele 6.2 și 6.3 sînt cuprinse reprezentările schematice și proiecțiile stereografice ale unor complexe de elemente de simetrie din fiecare clasă.

În tabelul 6.1, în afară de simboluri, sînt date și denumirile claselor de simetrie: sistemul Institutului Fiodorov de pe lângă Institutul geologic din Leningrad, explicat deja mai sus (la deducerea lui) și sistemele denumirilor după Groth și după Schoenflies, care sînt explicate în continuare.








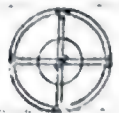
În afară de împărțirea în sisteme și singonii, cele 32 de clase de simetrie se mai pot grupa în subdiviziuni mult mai largi, în funcție de una dintre următoarele caracteristici.

1. Existența sau absența centrului de simetrie. În clasele centrate sau în cele planare nu pot exista direcții polare, ceea ce înseamnă că nu pot exista și proprietăți care să caracterizeze simetria polară; celelalte clase sînt clase necentrate.














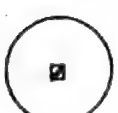










2. Enantiomorfismul. Cristalele care fac parte din clasele care au numai axe de simetrie de rotație, dar în care nu există axe de inversie, planuri transversale și centru de simetrie, se pot prezenta sub două variante: drepte sau stîngi. În ele sînt posibile forme drepte sau stîngi (v. fig. 3.9) cît și astfel de proprietăți cum ar fi rotirea planului de polarizare (rotirea planului de polarizare este posibilă numai în cristalele enantiomorfe — v. § 81). Enantiomorfe sînt clasele primitive și axiale.

3. Clasele de simetrie Laue sau subsistemele. Conform legii Friedel sau legii conform căreia efectul de difracție este centrosimetric datorită simetriei reflexiei radiațiilor Röntgen, simetria de difracție a cristalului este superioară față de simetria lui punctuală. Ea corespunde grupului punctual plus un centru de inversie și plus elemente de simetrie generate datorită adăugării

Proiecțiile stereografice ale complexelor elementelor de simetrie ale celor 32 de clase

	Sistemele	Clasele					
		Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie
Categorii Inferioară	Triclinic	 1		 $\bar{1}$			
	Monoclinic				 2	 m	 $2/m$
	Rombic				 222	 mm	 $mm2$

Tabelul 6.3 (continuare)

		Sistemele	Clasele					
			Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie
Categoria medie	Trigonal	 3		 $\bar{3}$	 32	 3m		 $\bar{3}m$
	Hexagonal	 6	 $\bar{6}$	 6/m	 622	 6mm	 $\bar{6}m2$	 6/mmm
	Tetragonal	 4	 $\bar{4}$	 4/m	 422	 4mm	 $\bar{4}2m$	 4/mmm
Categoria superioară	Cubic	 23		 m3	 432	 $\bar{4}3m$		 m3m

Tabelul 6.4

Împărțirea substanțelor studiate în cele 32 de clase
(Nowacki, 1967)

	Numărul absolut de substanțe			În procente *		
	anorganice	organice	total	anorganice	organice	total
1	6	35	41	—	1	0,5
$\bar{1}$	97	152	249	2	5	3
2	42	325	367	1	10	4
<i>m</i>	32	38	70	1	1	1
2/ <i>m</i>	705	1203	1908	13	37	22
222	86	510	596	1,5	16	7
<i>mm</i> 2	99	127	226	2	4	3
<i>mmm</i>	835	323	1158	15	10	13
4	5	12	17	—	—	—
$\bar{4}$	30	17	47	0,5	0,5	0,5
4/ <i>m</i>	97	38	135	2	1	1,5
422	25	43	68	0,5	1	1
4 <i>mm</i>	8	6	14	—	—	—
$\bar{4}2m$	78	29	107	1	1	1
4/ <i>mmm</i>	520	59	579	9	2	7
3	12	13	25	—	—	—
$\bar{3}$	114	38	152	2	1	2
32	62	10	72	1	—	1
3 <i>m</i>	69	37	103	1	1	1
$\bar{3}m$	415	29	444	7,5	1	5
6	9	9	18	—	—	—
$\bar{6}$	1	—	1	—	—	—
6/ <i>m</i>	82	15	97	1,5	0,5	1
622	38	14	52	1	—	1
6 <i>mm</i>	74	6	80	1	—	1
$\bar{6}m2$	38	4	42	1	—	0,5
6/ <i>mmm</i>	347	8	355	6	—	4
23	23	72	15	1	0,5	1
<i>m</i> 3	197	15	212	3,5	0,5	2
432	12	9	21	—	—	—
$\bar{4}3m$	203	16	219	4	0,5	2,5
<i>m</i> 3 <i>m</i>	1162	62	1223	21	2	14

* Semnul „—” înseamnă < 0,5%

centrului de inversie. Subsistemele sînt date în tabelul 7.1; în categoria inferioară ele coincid cu înseși sistemele, în categoriile medie și superioară fiecare sistem se subdivide în două subsisteme: superior și inferior. În fiecare subsistem intră o clasă centrosimetrică și una enantiomorfă; este posibilă existența în ele și a altor clase, nefiind însă obligatorie. Subsistemele se numesc, de asemenea, *clase Laue*, fiind notate cu simbolurile care intră în clasele lor centrosimetrice.

Împărțirea claselor în 7 sisteme și 32 clase este foarte neuniformă (tab. 6.4). Dintre cele două mii de substanțe cristaline naturale și sintetizate artificial a căror structură este cunoscută, mai mult de jumătate revine cristalelor din categoria inferioară, dacă le luăm după denumiri (Nowacki, 1967). Cu totul altă situație se obține dacă judecăm după răspindirea substanțelor în stare cristalină și după valoarea lor practică.

Aproape toate metalele și aliajele lor cristalizează în clasa $m\bar{3}m$ din singonia cubică, sau $6/mmm$ din singonia hexagonală. Semiconductorii elementari — germaniul, siliciul, staniul cenușiu și diamantul — cristalizează în clasa $m\bar{3}m$ din singonia cubică (structură de tipul diamantului). Celelalte cristale semiconductoare aparțin în marea lor majoritate clasei $\bar{4}3m$ din singonia cubică (structură de tip sfalerit) și clasei $\bar{6}m2$ din singonia hexagonală (structură de tip wurtzit).

Printre cele 32 de clase există clase bogat reprezentate. Din clasa $2/m$ fac parte aproape două mii de substanțe, ca gipsul, feldspaturile, micile, naftalenul, antracenu, triglicinsulfatul etc. Foarte bogată este și clasa $mm2$, care numără mai bine de o mie de reprezentanți. Aproape că nu există substanțe care să cristalizeze în clasele 4, 3, 6, 432.

§ 7. GRUPURI DE SIMETRIE LIMITĂ (GRUPURI CURIE)

Mai sus (§ 1) s-a remarcat dualitatea căilor de analiză a cristalelor și a proprietăților lor fizice. În cadrul studiului geometriei structurii și al proprietăților ce depind de defectele de structură, cristalele trebuie considerate ca medii discrete, pe cînd pentru tratarea unei întregi serii de proprietăți fizice (termice, electrice, optice, elastice etc.), cristalul poate fi considerat ca un mediu continuu, omogen. În grupurile de simetrie a cristalului ca mediu continuu, compact intră numai axele de ordin 2, 3, 4, 6, pe cînd în grupurile de simetrie a proprietăților unui astfel de mediu pot intra și axe de simetrie de ordin infinit, pe care le vom nota cu semnul ∞ . În afară de aceasta, axele pot intra și în grupurile de simetrie a cîmpurilor fizice: electric, magnetic, cîmpul tensiunilor mecanice.

Grupurile punctuale de simetrie în care intră axe de simetrie de ordin infinit se numesc *grupuri de simetrie limită* sau *grupuri Curie*. Există șapte asemenea grupuri, iar fiecare dintre cele 32 grupuri punctuale de simetrie ale cristalelor reprezintă un subgrup al cel puțin uneia dintre grupurile punctuale limită, fiind

Tabelul 7.1

Clasele cristalografice și clasele limită
(notațiile internaționale și notațiile Schoenflies)

Subsistemul		inferior			superior			
Categoria	Clasa Sistemul	primitivă	primitivă de inversie	centrată	axială	planară	planară de inversie	planaxială
inferioară	triclinic	1 C_1		$\bar{1}$ C_i				
	monoclinic				2 C_2	m C_{1h}		$2/m$ C_{2h}
	rombic				222 $D_2 = V$	mm^2 C_{2v}		mmm $D_{2h} = V_h$
medie	trigonal	3 C_3		$\bar{3}$ $C_{3i} = S_6$	32 D_3	$3m$ C_{3v}		$\bar{3}m$ D_{3v}
	tetragonal	4 C_4	$\bar{4}$ S_4	$4/m$ C_{4h}	422 D_4	$4mm$ C_{4v}	$\bar{4}2m$ $D_{2d} = V_d$	$4/mmm$ D_{4h}
	hexagonal	6 C_6	6 C_{3h}	$6/m$ C_{6h}	622 D_6	$6mm$ C_{6v}	$\bar{6}m2$ D_{3h}	$6/mmm$ D_{6h}
superioară	cubic	23 T		$m\bar{3}$ T_h	432 O	$\bar{4}3m$ T_d		$m\bar{3}m$ O_h
Grupuri Curie	texturi	∞ C_∞		∞/m $C_{\infty h}$	$\infty 2$ D_∞	∞m $C_{\infty v}$		∞/mmm $D_{\infty h}$
	corpuri izotrope				$\infty\infty$ R			$\infty\infty/m$ R_i

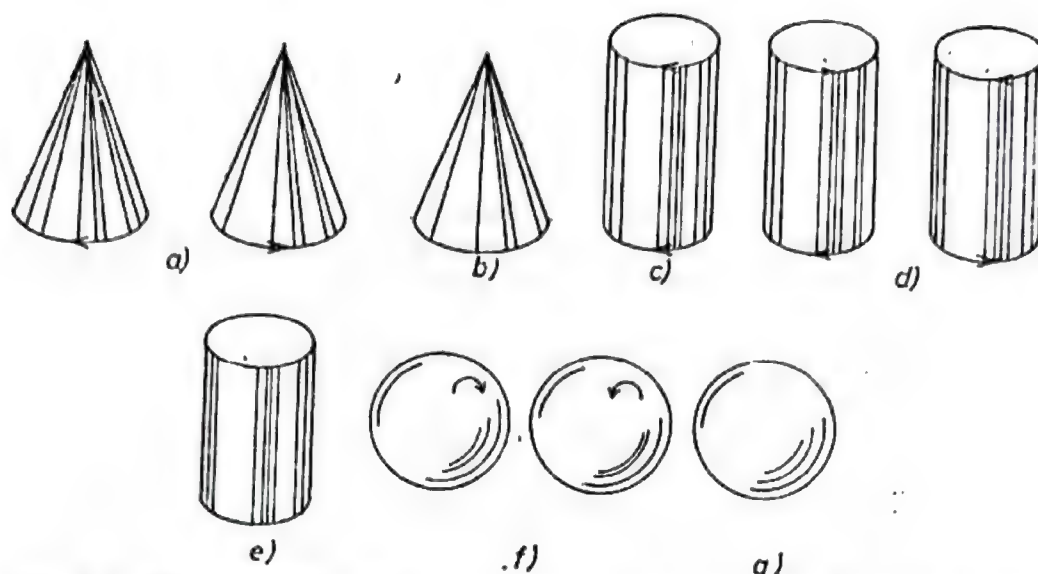


Fig. 7.1. Figuri geometrice care ilustrează grupurile de simetrie punctuale limită : ∞ , drept și stîng (a); ∞m (b); ∞/m (c); $\infty 2$, drept și stîng (d); ∞/mm (e); $\infty\infty$, drept și stîng (f); $\infty\infty m$ (g).

subordonat aceluia dintre ele, care, față de acest subgrup constituie subgrupul limită cel mai apropiat (tab. 7.1). Astfel, de exemplu, grupul limită de simetrie, caracterizat printr-o singură axă de simetrie de ordin infinit, ∞ , conține subgrupurile cristalografice 6, 4, 3, 2, 1, acestea fiindu-i subordonate anume lui, deși și toate celelalte grupuri limită sînt tot subgrupuri ale lui. Figura geometrică corespunzătoare grupului punctual ∞ este un con care se rotește: el se suprapune cu sine prin rotirea cu orice unghi în jurul axei de simetrie, nemaiaivînd însă nici un alt element de simetrie (fig. 7.1).

Același con, care însă nu se rotește, se caracterizează prin grupul punctual ∞m , adică printr-o singură axă de simetrie de ordin infinit și un număr infinit de planuri de simetrie de-a lungul axei de simetrie. Axa de simetrie din con este polară. O astfel de simetrie prezintă, de pildă, cîmpul electric omogen: axa de simetrie coincide la acesta cu direcția liniilor de cîmp.

Simetria cîmpului magnetic omogen este exprimată de grupul limită ∞/m , adică de o singură axă de simetrie infinită și planul de simetrie perpendicular pe ea. O figură caracteristică pentru grupul ∞/m este un cilindru în rotație. Grupului ∞/m îi sînt subordonate grupurile $6/m$, $4/m$, $2/m$, m , $\bar{6}$, $\bar{4}$, $\bar{3}$, $\bar{1}$; afară de subgrupurile enumerate, tot subgrupuri cristalografice ale grupului ∞/m sînt și grupurile subordonate grupului limită ∞ .

În figura 7.1 sînt reprezentate figurile geometrice finite cu ajutorul cărora pot fi caracterizate grupurile simetriei limită. Un cilindru în repaus precum și un cilindru întins sau comprimat se caracterizează prin simetria ∞/mm , adică printr-o axă nepolară,

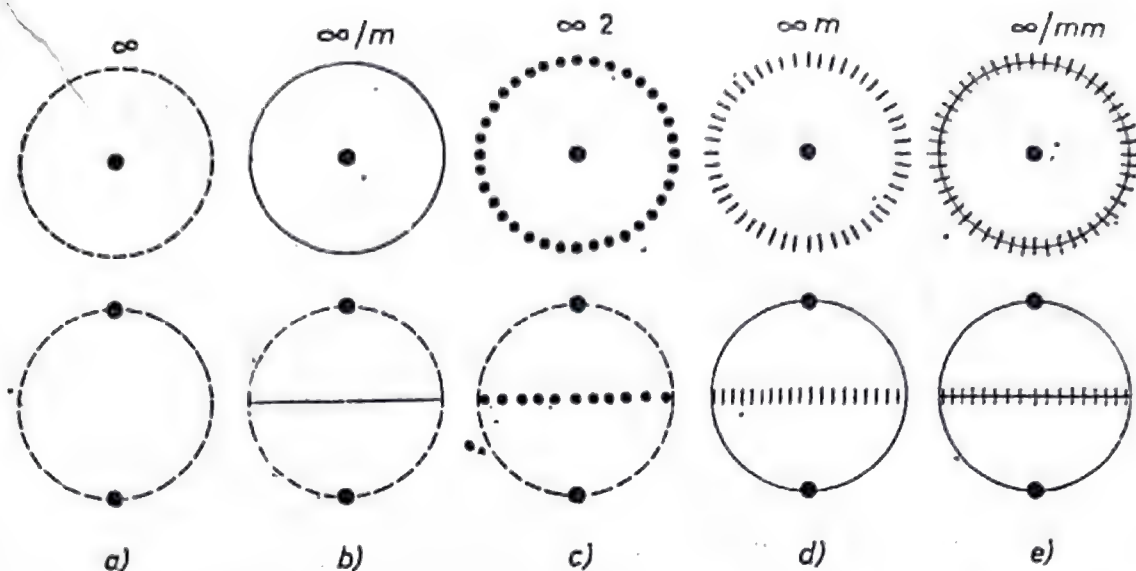


Fig. 7.2. Notațiile convenționale ale elementelor de simetrie ale celor cinci grupuri limită Curie, în proiecții stereografice: ∞ (a), ∞/m (b), $\infty 2$ (c), $\infty(m)$ (d), ∞/mm (e). Rîndul de sus: axa ∞ este perpendiculară la planul desenului; rîndul de jos: axa ∞ se află în planul desenului.

∞ , un număr infinit de planuri longitudinale, m , un plan m transversal, un număr infinit de axe transversale 2 și un centru de simetrie. Un cilindru torsionat după axa geometrică are o simetrie $\infty 2$, adică o axă nepolară ∞ și un număr infinit de axe transversale, 2. O sferă obișnuită se caracterizează prin grupul $\infty\infty m$, adică printr-un număr infinit de axe ∞ și printr-un număr infinit de planuri. Acest grup se numește *grup ortogonal*.

Figura aparte ce ar corespunde grupului punctual limită $\infty\infty$, ar putea fi imaginată ca o sferă la care toate razele se rotesc: există un număr infinit de axe ∞ , neexistînd însă planuri de simetrie. Grupul $\infty\infty$ se numește *grupul rotațiilor*.

Grupurile limită ∞ , $\infty 2$, $\infty\infty$ sînt enantiomorfe, adică figurile unei asemenea simetrii pot fi drepte sau stîngi. Grupurile subordonate lor sînt tot enantiomorfe.

Notațiile convenționale ale elementelor de simetrie ale grupurilor limită, în proiecțiile stereografice, sînt date în figura 7.2.

§ 8. SIMETRIA STRUCTURII CRISTALELOR

În structura cristalelor, la transformările de simetrie finite, care intră în grupul punctual de simetrie, se adaugă și transformările de simetrie infinite.

Transformarea simetrică infinită fundamentală este *translația*, adică o deplasare care se repetă la infinit de-a lungul unei drepte,

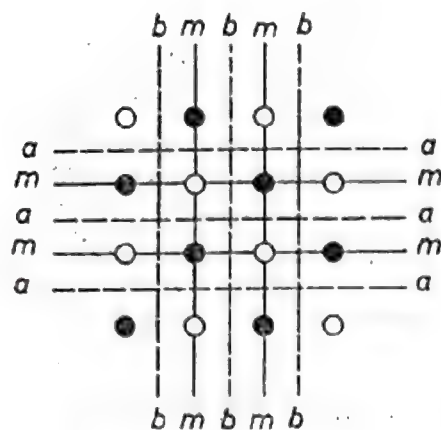


Fig. 8.1. Planurile de reflexie-alunecare, a , b , și planurile de simetrie de oglindire, m dintr-o rețea plană a structurilor de NaCl.

cu o aceeași distanță bine definită, denumită *perioada translației* (prin termenul „translație” se desemnează atât transformarea simetrică, elementul de simetrie, cât și, uneori, chiar perioada translației). Produsul dintre translație și operația de oglindire față de planul de simetrie dă naștere unei operații de simetrie complicată, infinită — transformarea cu ajutorul planului de reflexie cu alunecare. *Planul de reflexie cu alunecare* este ansamblul format din aplicarea simultană a planului de simetrie și a unei deplasări paralele cu aceasta, pe o distanță egală cu jumătate din perioada translației din plan. Acțiunea unui plan de reflexie cu alunecare poate fi ilustrată luind ca exemplu sarea gemă (fig. 8.1 — a se compara cu fig. 1.2). În desen este figurată o singură rețea plană având o structură de acest fel: ionii de Na și de Cl alternează ca pătrățelele unei table de șah. Pentru ca un ion să poată fi suprapus peste un ion de același fel, cel mai apropiat, trebuie ca reflectarea pe planul de simetrie a sau b să se facă simultan cu o deplasare corespunzătoare de $a/2$ sau $b/2$ în plan. Într-o astfel de re-

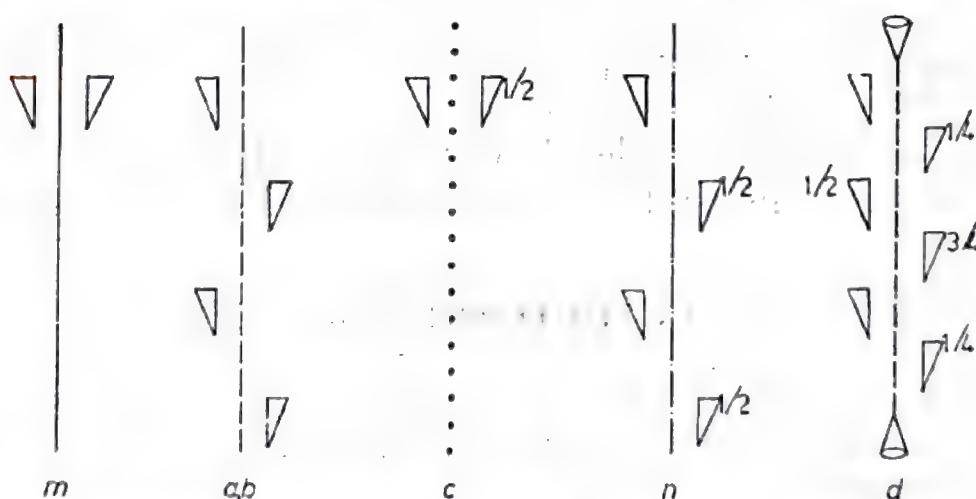


Fig. 8.2. Planul de reflexie-oglindire, m , și planurile de reflexie-alunecare, a , b , c , n , d .

flexie însoțită și de deplasare, se va suprapune cu ea însăși întreaga configurație a desenului plan infinit extins : $t_{a/2} \cdot m_a = a$; $t_{b/2} \cdot m_b = b$.

Prin centrele ionilor trec aici planuri de simetrie m , obișnuite, care alternează cu planurile de reflexie cu alunecare. Numărul ambelor feluri de planuri este infinit. Planurile de reflexie cu alunecare se notează cu simbolurile a, b, c , dacă alunecarea este orientată după axele a, b, c (XYZ), iar mărimea ei este de $a/2, b/2, c/2$.

Alunecarea poate fi orientată și după diagonala paralelogramului construit pe translațiile elementare a, b, c , din planul de alunecare. Anume, dacă deplasarea se face cu o jumătate din lungimea diagonalei paralelogramului, $(a + b)/2$, planul se notează cu simbolul n , iar dacă se face cu un sfert din lungimea diagonalei, $(a + b)/4$, cu simbolul d ; planurile d se numesc de tipul diamantului, deoarece ele sînt caracteristice structurii diamantului. Planurile de reflexie cu alunecare sînt reprezentate prin linii întrerupte de diferite tipuri (fig. 8.2). În cadrul reflexiei pe un plan de reflexie cu alunecare, figura se deplasează cu o jumătate din perioada translației ca a axei perpendiculare pe planul desenului. Pentru a indica faptul că figura simbol se află acum la o înălțime egală cu $c/2$ deasupra planului desenului, lângă ea se notează numărul „1/2”. Analog, numerele 1/4 sau 1/3 arată că figura simbol este plasată cu $c/4$ sau $c/3$ deasupra desenului. Transformarea simetrică prin intermediul planului de reflexie cu alunecare poate fi descrisă indicînd modul în care se modifică în cadrul ei coordonatele ori-cărui punct, x, y, z , luat arbitrar.

Produsul dintre o translație și o rotație în jurul unei axe de simetrie dă naștere rotației elicoidale. Se numește *axă de simetrie elicoidală* ansamblul format dintr-o axă de simetrie și translația după această axă, aplicate simultan. După efectuarea unei rotații complete, punctul inițial trebuie să se suprapună cu un alt punct absolut identic cu acesta, adică afindu-se la o depărtare de el egală cu o singură perioadă sau cu cîteva perioade de translație. Axele de simetrie elicoidale caracterizează, de exemplu, frunzele de arțar pe o ramură, boabele în spic, solzii conului de brad. Șurubul cu cap rotund are o axă de simetrie elicoidală de ordin infinit, iar în cazul în care capul șurubului este hexagonal, axa elicoidală este de ordinul șase. În spațiul cristalin axele de simetrie elicoidale pot fi numai de ordinele 2, 3, 4 și 6 (fig. 8.3). O axă elicoidală se notează cu o cifră, indexată tot cu cifre ; cifra arată, ca de obicei, ordinul axei, iar citul dintre indice și ordinul axei dă mărimea deplasării (translației) de-a lungul axei, în fracțiuni de translație elementară, după această axă.

Se deosebesc axe elicoidale stîngi și drepte. În tabelul 8.1 sînt reunite notațiile convenționale din sistemul internațional ale tuturor axelor elicoidale și ale planurilor de reflexie cu alunecare.

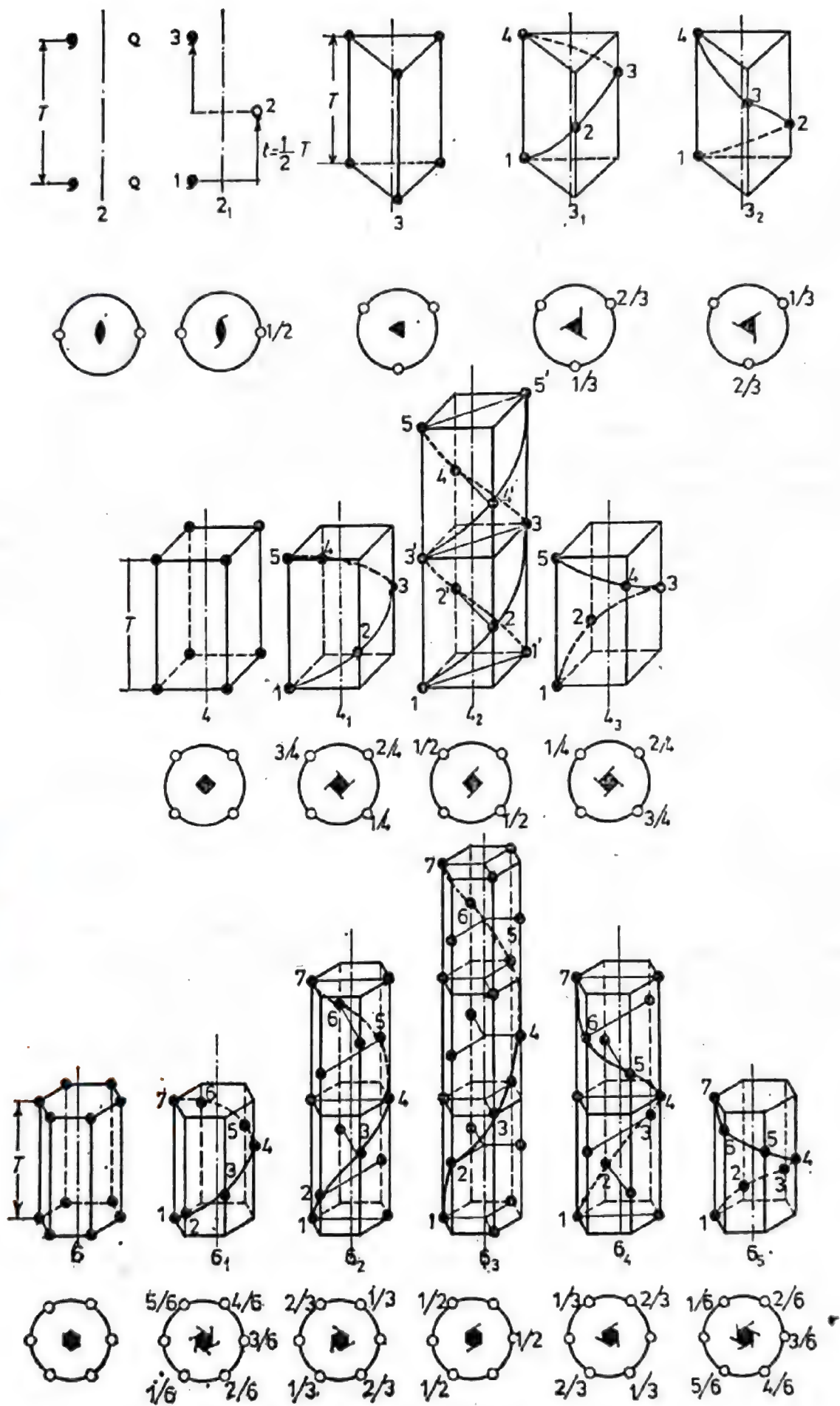


Fig. 8.3. Axe de simetrie elicoidale.

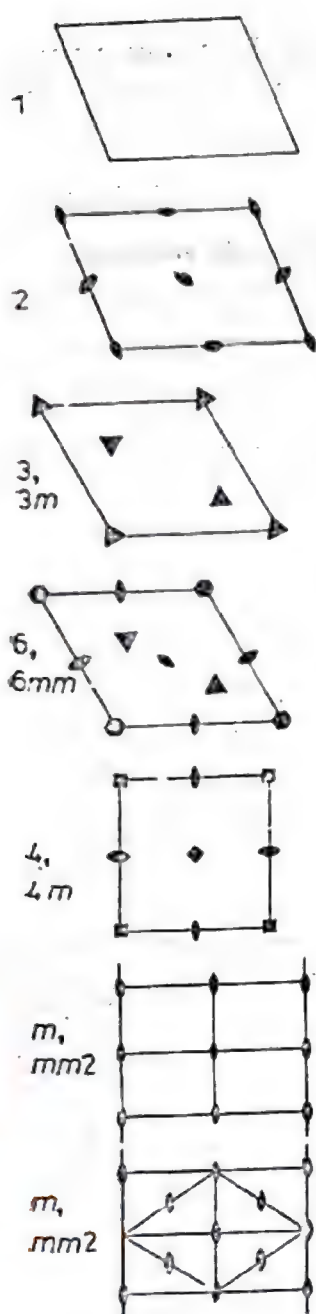


Fig. 9.1. Combinațiile elementelor de simetrie care corespund grupurilor de simetrie punctuale ale sistemelor plane.

În funcție de raportul dintre mărimi și de orientările reciproce ale celor trei translații elementare, a , b , c , se obțin rețele diferite, care se deosebesc una de alta prin simetria lor. Simetria limitează numărul de rețele posibile. Toate structurile cristaline sunt descrise prin 14 grupuri de translație, care corespund celor 14 rețele Bravais. Se numește *rețea Bravais* un sistem infinit de puncte, care se obține din repetarea prin translație a unui singur punct.

Cele 14 rețele Bravais se deosebesc între ele prin forma celulelor elementare și în funcție de simetria lor, fiind subîmpărțite în șase singonii. Subîmpărțirea în singonii s-a făcut încă de la începutul secolului al XIX-lea, numai pe baza examinării formei exterioare a mineralelor. Rezolvind problema distribuției simetrice a unor particule sferice (a punctelor materiale) în spațiu, în anul 1848 Bravais a ajuns la aceeași subîmpărțire în singonii.

Simetria spațiului cristalin limitează numărul de rețele posibile. Rețeaua trebuie să fie invariantă în raport cu toate transformările de simetrie posibile pentru un spațiu cristalin dat.

Principiul deducerii rețelelor Bravais va fi examinat luând ca exemplu rețelele bidimensionale. O rețea plană este definită de o pereche de vectori ai bazei, a_1 , a_2 ; parametrii celulei sunt a , b , γ . Cu rețeaua plană trebuie să fie compatibile rotațiile în jurul axelor 1, 2, 3, 4, 6, perpendiculare la planul rețelei, reflexiile pe planurile de simetrie, de asemenea perpendiculare la planul rețelei; sunt incompatibile cu ea orice transformări de simetrie care ar scoate rețeaua din planul său.

Dintre cele 32 de grupuri de simetrie punctuale, sistemelor plane le sunt adecvate numai 10 grupuri punctuale (fig. 9.1): 1, 2, 3, 4, 6, m , mm_2 , $3m$, $4mm$, $6mm$. Numai aceste combinații ale elementelor de simetrie lasă punctul într-un plan dat. În toate grupurile punctuale bidimensionale, axa principală de simetrie este perpendiculară pe planul considerat, planurile de simetrie trecând prin această axă. În grupul m se poate considera formal că planul m este după axa 1, normală la planul considerat.

Care sînt valorile posibile ale translațiilor a , b , și ale unghiului dintre ele, γ , în rețelele plane? În cazul general, $a \neq b$, $\gamma \neq 90^\circ$, obținem o rețea scalenă, cu laturile celulei inegale. Cu ea sînt compatibile rotațiile în jurul axelor 1 și 2. Existența axei 4 impune ca rețeaua să fie pătrată, adică $a = b$, $\gamma = 90^\circ$. Prezența axelor 3 și 6 implică neapărat ca rețeaua să fie hexagonală, adică $a = b$, $\gamma = 120^\circ$.

Pentru a afla ce determină existența unui plan m , normal la planul rețelei, vom exprima vectorii bazei, a , b , prin versorii i și j ai sistemului de coordonate

$$a = a_x i + a_y j, \quad (9.1)$$

$$b = b_x i + b_y j.$$

Să considerăm că planul de simetrie m trece prin axa X . Atunci prin oglindirea pe acest plan, obținem

$$a' = a_x i - a_y j, \quad (9.2)$$

$$b' = b_x i - b_y j.$$

Pentru ca translațiile a' și b' să fie tot translații ale rețelei, există numai două posibilități: prima este $a = ai$, $b = bj$, ceea ce dă o rețea dreptunghiulară, $a = b$, $\gamma = 90^\circ$, iar a doua, $b' = a - b$, adică $b'_x = a_x - b_x$, $b'_y = a_y - b_y$. Această soluție se va obține din (9.1) și (9.2) pentru $a_y = 0$ și $a_x = 2b$, adică pentru $a = ai$ și $b = 1/2 a_x i + b_y j$.




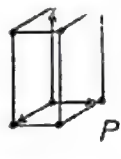
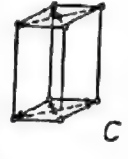




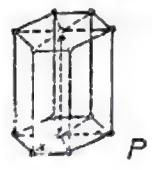

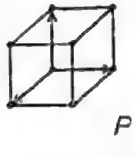
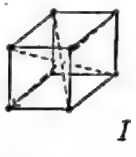
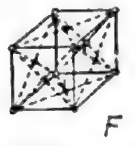
În al doilea caz, pe translațiile a , b se construiește celula dreptunghiulară centrată, adică o celulă care are în centru încă un nod, $a \neq b$, $\gamma = 90^\circ$. Această rețea cristalografică poate fi trasată și cu ajutorul unei rețele matematice alcătuite din romburi, obținîndu-se o celulă primitivă necentrată. Celula centrată este totuși mai comodă, ea permițînd folosirea sistemului de coordonate ortogonale.

Prin urmare, avem cinci rețele Bravais plane: paralelograme, dreptunghiuri, romburi, triunghiuri și pătrate.

La fel se deduc cele 14 rețele Bravais spațiale (tabelele 9.1 și 9.2). Celulele elementare în rețelele Bravais se aleg astfel încît: 1) simetria lor să corespundă simetriei întregii rețele (mai exact: simetria celulei elementare trebuie să coincidă cu simetria clasei holodrice a sistemului căruia îi aparține cristalul); 2) numărul unghiurilor drepte și al laturilor egale să fie maxim; 3) volumul celulei să fie minim.

Tabelul 9.1

Cele 14 rețele Bravais

Singoia	Rețeaua cristalografică				
	primitivă	cu bazele centrate	centrată în volum	cu fețele centrate	romboedrică
triclinală					
monoclinică					
rombică					
tetragonală					
hexagonală					
cubică					

Rețelele Bravais joacă un rol enorm în cristalografie. Orice structură cristalină poate fi reprezentată cu ajutorul uneia dintre cele 14 rețele Bravais.

Există următoarele tipuri de rețele Bravais : *P* — primitive, *I* — centrate în volum, *F* — cu fețele centrate, *A*, *B*, *C* — cu bazele centrate (centrate lateral) (literele *A*, *B*, *C* indicând care dintre cele trei perechi de fețe este centrată : *A* — sînt centrate fețele

normale la translația a , adică la axa X ș.a.m.d.), R — romboedrică.

Celulele primitive Bravais sînt celulele principale, în funcție de care se disting singoniile cristalografice. În sistemul trigonal, alături de prismă ca celulă elementară primitivă poate fi și rom-

Tabelul 9.2

Notarea tipului de celulă și a grupului translațiilor pentru cele 14 rețele Bravais

Singonia	Rețeaua cristalografică				
	Primitivă	Cu bazele centrate	Centrată în volum	Cu fețele centrate	Romboedrică
Triclinică	P, Γ_{tr}				
Monoclinică	P, Γ_m	C, Γ_m^b			
Rombică	P, Γ_0	C, Γ_m^b	I, Γ_0^v	F, Γ_0^t	
Tetragonală	P, Γ_q		I, Γ_q^v		
Hexagonală	P, Γ_h				R, Γ_{rh}
Cubică	P, Γ_c		I, Γ_c^v	F, Γ_0^t	

boedrul (R) — figură în care $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$. În singonia hexagonală, drept celulă elementară primitivă se ia prisma avînd muchia paralelă cu axa 6, iar baza în formă de romb, $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

Celula elementară a structurii hexagonale este o prismă cu șase fețe, formată din trei celule elementare primitive; ea reflectă atît simetria cristalelor trigonale cît și a celor hexagonale. Pentru singonia hexagonală este mai comod, uneori, să se utilizeze așa-numita *celulă ortohehexagonală*, de asemenea neprimitivă, pentru care $a \neq c$, $b = a\sqrt{3}$.

În celulele primitive nodurile rețelei sînt așezate numai în vîrfurile celulei, pe cînd în celulele complexe mai există și alte noduri: în celula centrată în volum, I , încă un nod în centrul celulei; în celula cu fețe centrate, F , încă un nod în centrul fiecărei fețe; în celula cu bazele centrate, C (sau A , sau B), cîte un nod în centrul unei perechi de fețe paralele. Nodul dintr-un vîrf al unei celule aparține simultan celor opt celule vecine, iar nodul din centrul unei fețe aparține concomitent la două celule vecine. Rezultă de aici că în total volumului unei celule îi revin: celulă P — 1 nod, celulă I — 2 noduri, celulă F — 4 noduri, celulă C — 2 noduri.

O celulă primitivă hexagonală poate fi realizată și folosind o celulă romboedrică, R , însă în acest caz romboedrul nu trebuie să fie primitiv: el are două noduri suplimentare, de coordonate $[[1/3, 2/3, 1/3]]$ și $[[2/3, 1/3, 2/3]]$.

Rețeaua romboedrică poate fi considerată, de asemenea, ca o rețea hexagonală centrată: într-o celulă hexagonală primitivă există două noduri suplimentare cu coordonatele $[[00,1/3]]$ și $[[00,2/3]]$.

Toate cele patru tipuri de celule — P, I, F, C — există numai în singonia rombică, celelalte singonii conținând un număr mai mic de celule (v. tab. 9.1). De exemplu, în singonia cubică nu există celulă Bravais cu bazele centrate, dat fiind că ea ar contrazice simetria rețelei cubice: dacă este centrată o pereche de fețe ale cubului, atunci, datorită simetriei cubului, obligatoriu vor fi centrate și celelalte două perechi de fețe, adică celula C va deveni celulă F . În singonia tetragonală nu există celulă C : ea ar fi compatibilă cu simetria rețelei, însă nu ar satisface condițiile de selecționare a celulelor Bravais; în locul ei se poate, la fel de bine, lua o celulă primitivă, al cărei volum este de două ori mai mic.

Folosind aceleași raționamente se poate demonstra că celulele reprezentate în tabelul 9.1 sînt complet suficiente pentru toate singoniile. Cele 14 rețele Bravais epuizează toate rețelele de translație posibile, care descriu orice structură cristalină.

În structura unui cristal rețelele Bravais se pot întrepătrunde una cu alta, astfel încît în virfurile diferitelor rețele să poată sta fie același tip de atomi, fie atomi diferiți, atît sfero-simetrice, cit și cu simetrie cristalografică reală. Toate tipurile de structuri sînt descrise de 230 grupuri de simetrie spațială, care se formează din combinații ale elementelor de simetrie ale structurilor infinite.

Înmulțirea elementelor de simetrie ale structurilor se supune aceluiași teoreme, 1—6 (§ 3 și § 6), care descriu simetria unui poliedru. În afară de aceasta, datorită adăugirii repetărilor infinite, apar combinații noi. Vom enunța cîteva dintre ele (numerotarea teoremelor o continuăm pe cea din § 3 și § 6). Ca și pentru înmulțirea elementelor de simetrie ale poliedrelor, nu vom da demonstrații amănunțite, ci numai exemple ilustrative (demonstrația cea mai completă și perfectă a fost dată de N. V. Belov — vezi N. V. Belov, 1951).

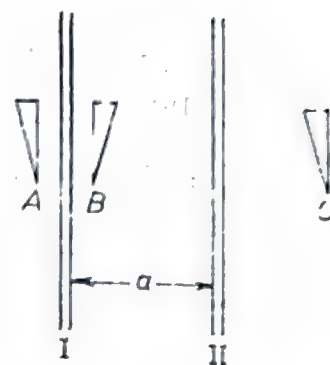
Teorema 7. Reflexia succesivă în două planuri de simetrie paralele este echivalentă cu o translație avînd parametrul $t = 2a$, unde a este distanța dintre planuri.

În figura 9.2, I și II sînt două planuri de simetrie paralele. Reflexia în planul I dă transformarea $A \rightarrow B$, reflexia în planul II dă $B \rightarrow C$ și se vede direct din desen că distanța dintre punctele corespunzătoare triunghiurilor A și C este egală cu $2a$.

Două reflexii succesive $A \rightarrow B$ și $B \rightarrow C$ pot fi înlocuite cu o translație $A \rightarrow B = 2t$

$$m_{II} \cdot m_I = t. \quad (9.3)$$

Fig. 9.2. Două planuri de reflexie paralele sînt echivalente unei translații.



Teorema 7a. Oricare translație t poate fi înlocuită cu o reflexie în două planuri paralele, care se află la distanța $t/2$ unul de altul.

Teorema 7a, reciprocă teoremei 7, se demonstrează analog și rezultă din figura 9.2.

Teorema 8. Un plan de simetrie și o translație perpendiculară pe el cu parametrul t generează noi planuri de simetrie, „intercalate”, paralele cu planul generator, de tip analog cu acesta, la o distanță $t/2$ de el.

În figura 9.3, a, translația este perpendiculară la planul de simetrie I. Reflexia în planul I dă transformarea $A \rightarrow B$, translația t , transformarea $A \rightarrow C$, $B \rightarrow D$. Se vede că B și C , ca și

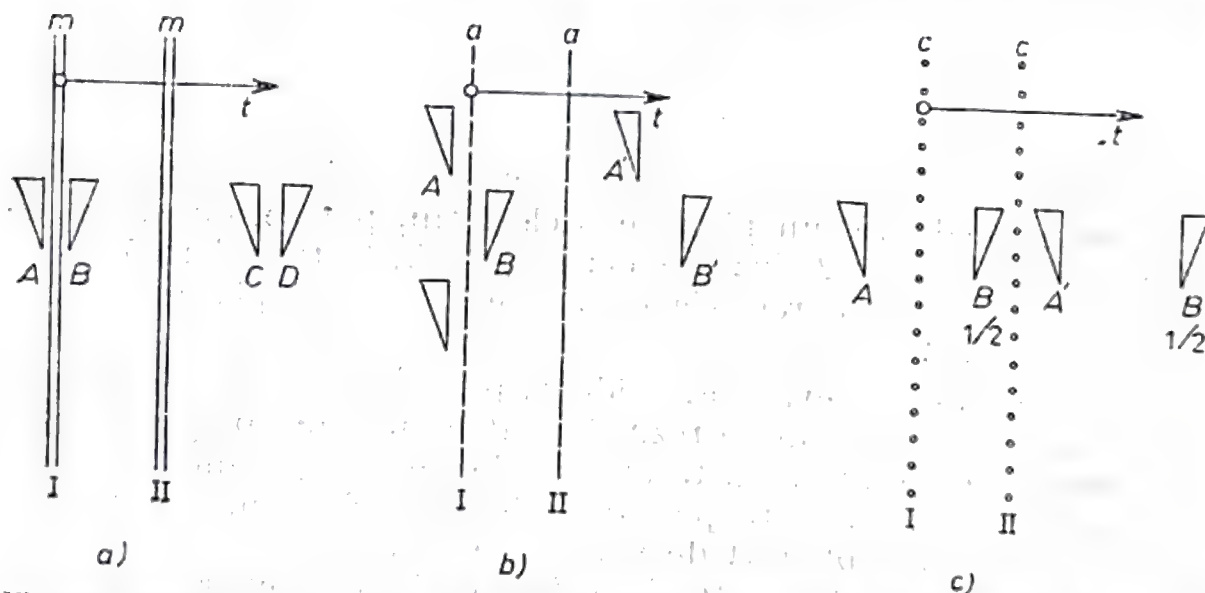


Fig. 9.3. Un plan de simetrie și o translație perpendiculară pe el generează un plan intermediar cu același nume : plan de simetrie (a), plan de reflexie-alunecare, deplasarea făcându-se în planul desenului (b), plan de reflexie-alunecare, deplasarea făcându-se perpendicular la planul desenului (c).

A și D , sînt legate prin încă o reflexie în planul de simetrie II generat (intercalat)

$$m_I \cdot t_{\perp} = m_{II}. \quad (9.4)$$

Teorema 8 este adevărată independent de tipul planului generator : un plan de reflexie cu alunecare și o translație t , perpendiculară pe acesta, vor genera un plan de reflexie cu alunecare cu aceeași mărime și direcție a alunecării, aflat la distanța $t/2$ de planul generator, în sensul translației.

În figura 9.3, b, teorema este ilustrată pentru un plan de tipul a (deplasarea are loc după axa X), iar în figura 9.3, c, pentru un plan de tipul c (deplasarea se produce după axa Z , normală la planul desenului). În ambele cazuri translația t este perpendiculară la planul generator I.

Transformarea în planul de reflexie cu alunecare dă $A \rightarrow B$ (fig. 9.3, c); în cazul unui plan c , figura simbol B este ridicată deasupra planului desenului cu $c/2$, ceea ce este notat cu semnul „1/2”. Translația t dă transformările $A \rightarrow A'$ și $B \rightarrow B'$. Evident, între B și A , la distanța $t/2$, trece planul generat II, de reflexie cu alunecare, de același tip cu planul generator, I.

T e o r e m a 9. Planul de simetrie și translația t , care face cu planul unghiul α , generează un plan de reflexie cu alunecare, paralel cu planul generator, la o distanță de $(t/2)\sin\alpha$ de el, în sensul în care are loc translația; mărimea alunecării după planul generat este egală cu $t\cos\alpha$.

Pentru demonstrarea acestei teoreme să descompunem translația t în două componente, $t_{\perp} = t\sin\alpha$ și $t_{\parallel} = t\cos\alpha$

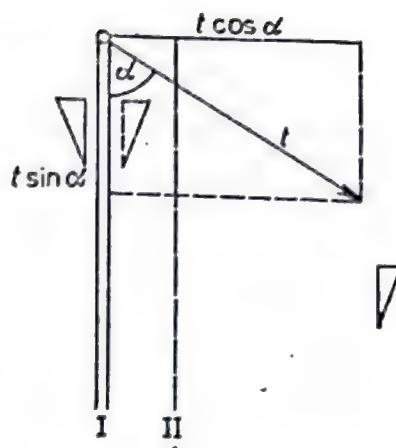
$$t_{\perp} \cdot t_{\parallel} = t_{\alpha}. \quad (9.5)$$

Combinarea planului generator cu $t_{\perp} = t\sin\alpha$ dă, conform teoremei precedente, un plan de același tip, paralel cu cel generator, la distanța $(t/2)\sin\alpha$ de el; translația t_{\parallel} transformă acest plan într-un plan de reflexie cu alunecare, cu deplasarea $t_{\parallel} = t\cos\alpha$ (fig. 9.4).

Teorema este adevărată, evident, pentru orice tip de planuri generatoare. Din teorema 9 rezultă că dacă într-un grup punctual de simetrie a cristalului există planuri de simetrie, atunci în structura acestui cristal, între planurile de simetrie generatoare vor apărea obligatoriu planuri de simetrie generate simple sau planuri de reflexie cu alunecare. Tipurile de planuri generate depind atât de tipurile de planuri generatoare, cât și de setul translațiilor celulei elementare Bravais, adică de tipul rețelei Bravais.

T e o r e m a 10. O axă de simetrie cu unghiul de rotație α și o translație t , perpendiculară pe ea, generează o axă de simetrie de același tip, paralelă cu axa inițială, plasată la distanța de $(t/2)\sin(\alpha/2)$, care se află pe dreapta perpendiculară pe translația t , în mijlocul ei.

Fig. 9.4. Planul m și o translație care face cu acesta unghiul α dau naștere unui plan de reflexie cu alunecare.



Fie (fig. 9.5) A_α punctul de ieșire a unei axe simple de simetrie, cu unghiul de rotație α , iar t o translație, perpendiculară pe ea. Conform teoremei 2a (§ 3) vom înlocui axa A_α cu două planuri de simetrie care se intersectează, luând unul dintre aceste planuri, m_\perp (I), perpendicular pe translația t , iar pe cel de al doilea, m_\parallel (II), sub unghiul $\alpha/2$ față de primul. Conform teoremei 7a, vom înlocui translația t cu două planuri de simetrie paralele, m_I și m_{III} (III); m_{III} împarte translația t în două părți egale. Două reflexii consecutive în planul m_I dau în total transformarea unitate

$$A_\alpha \cdot t_\perp = m_I \cdot m_{II} \cdot m_I \cdot m_{II} = 1 \cdot m_{II} \cdot m_{III}. \quad (9.6)$$

Conform teoremei 2 (§ 3), cele două planuri de simetrie care se intersectează sub un unghi $\alpha/2$ sînt identice cu o axă de simetrie cu unghiul de rotație α , după linia de intersecție a lor

$$m_{II} \cdot m_{III} = A'_{\alpha/2},$$

adică generează axa de simetrie A_α .

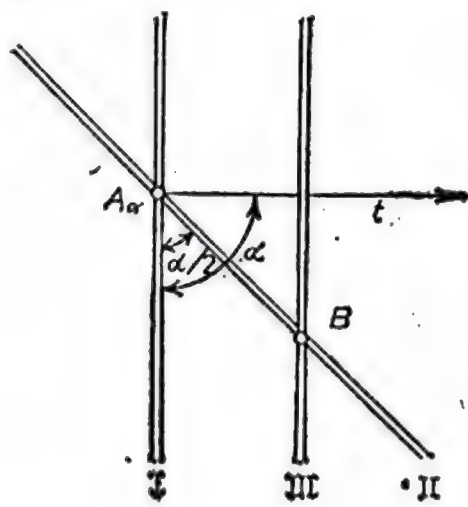


Fig. 9.5. O axă de simetrie și translația perpendiculară pe ea generează o axă de simetrie paralelă.

Din desen se vede că

$$AB = \frac{t/2}{\sin(\alpha/2)} = \frac{t}{2 \sin(\alpha/2)}.$$

Teorema este demonstrată.

Teorema 11. O axă de simetrie elicoidală cu unghiul de rotație α și deplasarea t și cu o translație t perpendiculară pe ea, dau naștere unei axe elicoidale cu același unghi și cu aceeași deplasare, paralelă cu axa inițială, la o distanță de ea de $(t/2)\sin(\alpha/2)$, care se află pe linia perpendiculară la translația t , la mijlocul ei.

Demonstrația se reduce la demonstrația precedentă, cu singura deosebire că axa elicoidală $A_{\alpha t_1}$ o reprezentăm drept produsul a două elemente $A_{\alpha t_1} = A_\alpha \cdot t_1$, dintre axa simplă de simetrie, A_α , și translația t_1 de-a lungul axei

$$\begin{aligned} A_\alpha \cdot t_1 \cdot t_1 &= m_\perp \cdot m_\parallel \cdot t_1 \cdot m_I \cdot m_{III} = \\ &= 1 \cdot t_1 \cdot m_{II} \cdot m_{III} = B'_\alpha \cdot t_1 = B_{\alpha t_1}, \end{aligned} \quad (9.8)$$

adică obținem o axă elicoidală cu același unghi de rotație, α , și cu aceeași deplasare, t_1 , axă plasată în punctul B (fig. 9.5).

Teorema 12. O axă de simetrie cu un unghi de rotație α și o translație t , făcînd cu ea unghiul β , generează o axă de simetrie elicoidală.

Pentru demonstrație descompunem translația t în componentele $t_\perp = t \cos \beta$ și $t_\parallel = t \sin \beta$

$$A_\alpha \cdot t = A_\alpha \cdot t_\perp \cdot t_\parallel. \quad (9.9)$$

Conform relațiilor (9.6), (9.7), (9.8) obținem o axă elicoidală de simetrie cu un unghi de rotație α , cu o valoare a deplasării $t \sin \beta$ la distanța $\frac{t}{2 \sin(\alpha/2)}$ față de A .

Teorema 13. O axă elicoidală de simetrie cu un unghi de rotație α și deplasarea t_1 și cu translația t , care face un unghi β cu axa, dau naștere unei axe elicoidale de simetrie avînd același unghi de rotație.

Demonstrația se reduce la demonstrația teoremei precedente, cu singura deosebire că rotația elicoidală $A_{\alpha t_1}$ o reprezentăm direct ca produsul dintre o rotație simplă și translația t_1

$$A_{\alpha t_1} = A_\alpha \cdot t_1 \cdot t_\perp \cdot t_\parallel = A'_\alpha \cdot t_1 \cdot t_\parallel = A'_{\alpha T}, \quad (9.10)$$

unde translația $T = t_1 \cdot t_\parallel$.

Din teoremele 12 și 13 rezultă că dacă printr-un unghi al celulei elementare trece o axă de simetrie, atunci combinația acestei axe cu translațiile grupului Bravais generează axe de simetrie simple și elicoidale, pe muchiile celulei, în centru și în pozițiile date de teoremele 12 și 13.

Deoarece o axă de simetrie α include în ea rotațiile multiple ale lui α , axele de simetrie care rezultă pot fi de ordine diferite. Vom analiza acest fapt luind ca exemplu axa 4, care include rotațiile $1, \pi/2, \pi, 3\pi/2$. Să-i adăugăm translațiile t_1 și t_2 ale celulei elementare primitive. Rotațiile rezultante vor fi

Rotația	Translațiile		
	t_1	t_2	t_1+t_2
1	1	1	1
$\pi/2$	$\pi/2$	$3\pi/2$	$\pi/2$
π	π	π	π
$3\pi/2$	$3\pi/2$	$3\pi/2$	$3\pi/2$

Din tabel se vede că axa 4, care trece printr-un vîrf al celulei primitive, generează o axă 4 în centrul celulei și axe 2 la mijlocul muchiilor ei.

În figura 9.6 sînt reprezentate combinațiile axelor de simetrie cu translațiile celulei Bravais primitive: axa 2 generează o axă 2 în centrul celulei și la mijlocul muchiilor; axa 3 generează două axe 3 în interiorul celulei; axa 4 generează o axă 4 în centrul celulei și axe 2 în mijlocul laturilor; axa 6 generează axe 2 în centrul celulei și în mijlocul muchiilor și axe 3 în interiorul celulei.

În figura 9.7 sînt ilustrate combinațiile axei de simetrie 4 cu translațiile celulei primitive, P , și ale celulei Bravais, I , centrate în volum: combinațiile de axe generate depind de setul translațiilor.

Teorema 14. O axă de inversie-rotație cu un unghi de rotație α și o translație t , perpendiculară pe axă, generează tot o axă de inversie-rotație, paralelă cu axa generatoare.

Descompunînd axa de inversie-rotație A_α în axa de rotație simplă A_α și inversia în centrul de simetrie, \bar{I} , reducem demonstrația la demonstrația precedentă. Aplicînd teorema 14 axei de inversie \bar{I} , obținem **corolarul**: un centru de simetrie și o translație t generează un nou centru de simetrie, deplasat față de centrul inițial în sensul translației t cu o jumătate din mărimea ei.

Teorema 15. O axă de inversie-rotație avînd unghiul de rotație α și o translație t , care face cu această axă unghiul β , generează o axă de inversie de același unghi α , paralelă cu axa inițială.

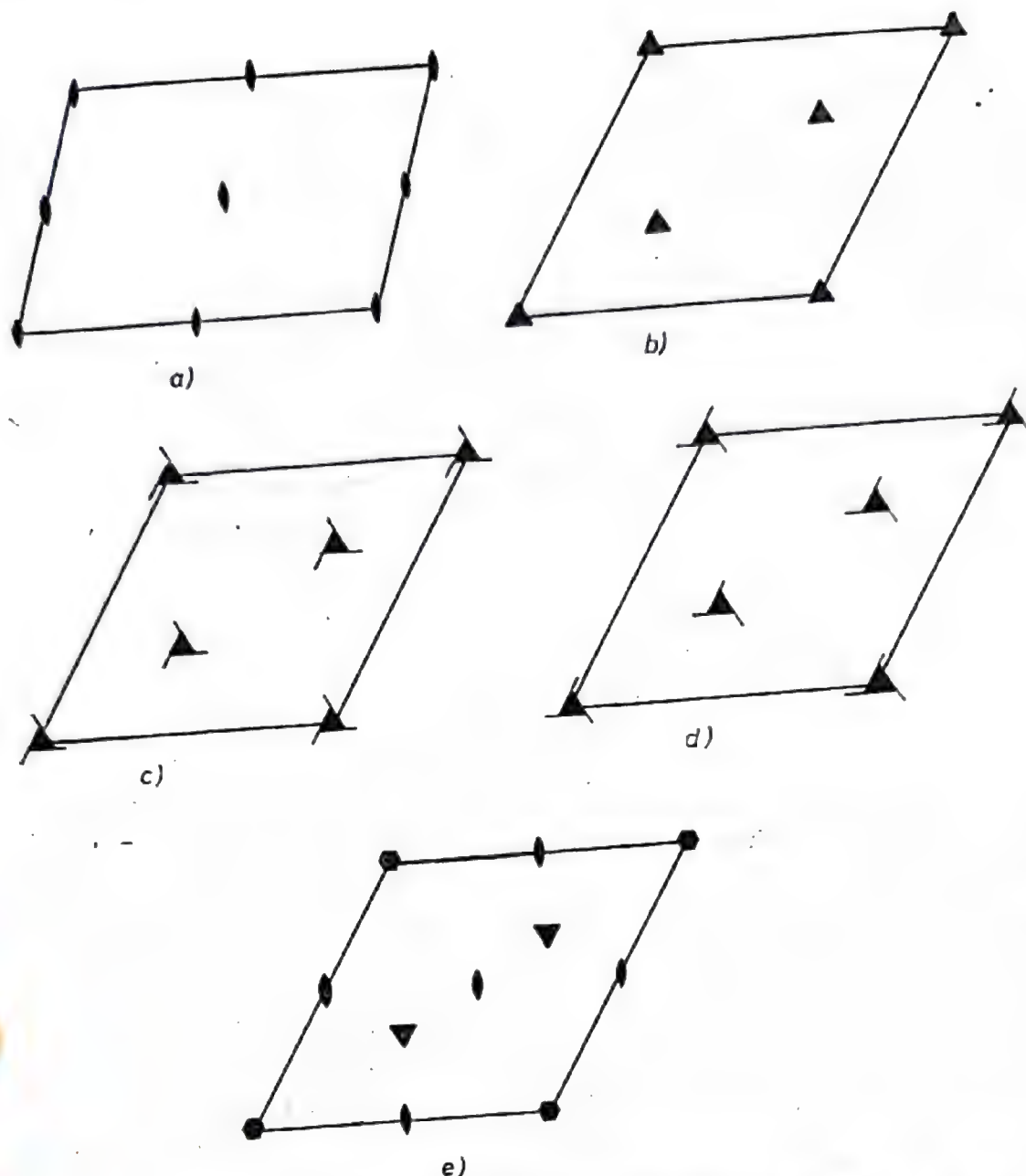


Fig. 9.6. Axele de simetrie generate prin translațiile celulei Bravais P în combinație cu axe 2, 3, 3_1 , 3_2 , 6, care trec prin vârful celulei, normal la planul desenului.

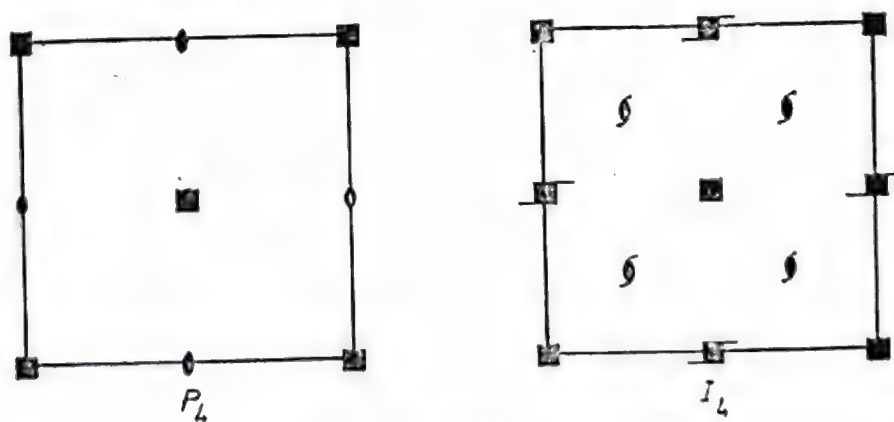


Fig. 9.7. Axele de simetrie generate prin translații ale celulelor Bravais P și I în combinație cu axa 4.

Demonstrația o vom reduce la demonstrația precedentă : descompunem translația t în $t_{||}$ și t_{\perp}

$$A_{\alpha,t} = A_{\alpha} \cdot \bar{I} \cdot t_{||} \cdot t_{\perp} = B_{\alpha} \cdot t_{||} \cdot \bar{I} = B_{\alpha} \cdot t_{||} = B'_{\alpha}$$

(după ce am folosit formulele (9.8) și (9.9)) și obținem

$$AB' = \frac{t}{2} \sin \beta / \cos (\alpha/2).$$

Toate teoremele din § 3 și din § 6 reprezintă cazuri particulare ale înmulțirii operațiilor de simetrie fără translații. Adăugarea translațiilor lărgeste lista elementelor de simetrie generate. Astfel, în teorema 2, § 3, s-a demonstrat că planurile de simetrie m , care se intersectează, generează o axă de simetrie de rotație. Din argumentarea demonstrațiilor precedentelor teoreme se vede că dacă planurile generatoare vor fi planuri de reflexie cu alunecare, atunci elementele care iau naștere se dovedesc a fi axe elicoidale, care trec prin linia de intersecție a planurilor sau sînt deplasate față de ea. Teorema asupra intersectării axelor de simetrie va da, și ea, o întreagă mulțime de soluții diferite, dacă se ține seama și de axele elicoidale de simetrie.

Teoremele și exemplele analizate nu epuizează combinațiile posibile ale transformărilor de simetrie infinite, dar ele ilustrează convingător diversitatea acestor combinații și principiul deducerii lor.

§ 10. CELE 230 DE GRUPURI SPAȚIALE DE SIMETRIE

Se numește *grup spațial de simetrie* combinarea tuturor transformărilor de simetrie ale unei structuri cristaline. Un grup spațial de simetrie caracterizează simetria structurii cristaline, exact după cum grupul punctual de simetrie caracterizează simetria formei exterioare a cristalului și simetria proprietăților lui macroscopice.

Fiecărui grup punctual îi corespund cîteva grupuri spațiale. Pentru ca din grupul spațial de simetrie al unui cristal să se obțină grupul lui punctual, trebuie să anulăm mintal toate translațiile, adică să transformăm planurile de reflexie cu alunecare în planuri de oglindire simple, axele elicoidale în axe de simetrie de rotație obișnuite și să reducem toate elementele de simetrie rămase într-un singur punct.

Tabelul 10.1

Împărțirea celor 230 de grupuri spațiale în clase, simfonii și tipuri de rețele

Simfonia	Clasa	Tipul de rețea					
		<i>P</i>	<i>A, C</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>R</i>	Total
Triclinică	1	1	—	—	—	—	1
	$\bar{1}$	1	—	—	—	—	1
	Total	2	—	—	—	—	2
Monoclinică	2	2	1	—	—	—	3
	<i>m</i>	2	2	—	—	—	4
	2/ <i>m</i>	4	2	—	—	—	6
	Total	8	5	—	—	—	13
Rombică	222	4	2	1	2	—	9
	<i>mm</i> 2	10	7	2	3	—	22
	<i>mmm</i>	16	6	2	4	—	28
	Total	30	15	5	9	—	59
Tetragonală	4	4	—	—	2	—	6
	$\bar{4}$	1	—	—	1	—	2
	4/ <i>m</i>	4	—	—	2	—	6
	422	8	—	—	2	—	10
	4 <i>mm</i>	8	—	—	4	—	12
	$\bar{4}2m$	8	—	—	4	—	12
	4/ <i>mmm</i>	16	—	—	4	—	20
	Total	49	—	—	19	—	68
Hexagonală	3	3	—	—	—	1	4
	$\bar{3}$	1	—	—	—	1	2
	32	6	—	—	—	1	7
	3 <i>m</i>	4	—	—	—	2	6
	$\bar{3}m$	4	—	—	—	2	6
	6	6	—	—	—	—	6
	$\bar{6}$	1	—	—	—	—	1
	6/ <i>m</i>	2	—	—	—	—	2
	622	6	—	—	—	—	6
	6 <i>mm</i>	4	—	—	—	—	4
	$\bar{6}m2$	4	—	—	—	—	4
	6/ <i>mmm</i>	4	—	—	—	—	4
	Total	45	—	—	—	7	52
Cubică	23	2	—	1	2	—	5
	<i>m</i> 3	3	—	2	2	—	7
	432	4	—	2	2	—	8
	$\bar{4}3m$	2	—	2	2	—	6
	<i>m</i> 3 <i>m</i>	4	—	4	2	—	10
	Total	15	—	11	10	—	36

Deducerea dintr-un grup punctual a tuturor grupurilor spațiale care îi aparțin este o problemă mult mai complicată. Aici trebuie examinate toate combinațiile de elemente de simetrie și de rețele Bravais posibile. Astfel, de exemplu, dacă într-un grup punctual intră axe 3 și 2, atunci în grupul spațial acestea pot fi întâlnite ca axe 3, 3₁, 3₂, 2 și 2₁ și trebuie încercate toate combinațiile posibile de axe și translații.

Astfel se obțin cele 230 de grupuri de simetrie spațiale continue ale spațiului cristalin, sau grupurile de simetrie Fiodorov. Fiecare dintre aceste grupuri satisface postulatele teoriei grupurilor, adică formează un grup matematic (tab. 10.1).

Cele 230 grupuri spațiale au fost deduse, în anii 1890—1894, concomitent și independent, de către E. S. Fiodorov și A. Schoenflies, cu două decenii înainte de a se fi reușit să se confirme experimental existența structurilor cristaline (în anul 1912 Laue a dovedit primul difracția radiațiilor Röntgen pe structurile cristaline). E. S. Fiodorov a scris relativ la aceasta, în anul 1914: „Nu mă pot abține să nu declar că nu am crezut niciodată că voi apuca să trăiesc să văd determinarea concretă a distribuției atomilor, prevăzută în lucrările mele la care m-am referit *. Într-o scrisoare adresată profesorului Groth ** îi scriam că de fapt aplicațiile detaliate ale sistemelor prezise în aceste cercetări vor începe să se realizeze peste încă 100 de ani”.

Pentru notarea grupurilor spațiale se utilizează simbolurile internaționale precum și simbolurile lui Schoenflies și cele ale lui E. S. Fiodorov.

Simbolul internațional al unui grup spațial este astfel alcătuit, încât după forma simbolului să se poată reprezenta mintal întreaga dispoziție reciprocă a elementelor de simetrie, dacă sînt cunoscute teoremele fundamentale asupra compunerii elementelor de simetrie infinite și regulile de scriere a simbolurilor, date în tabelul 10.2.

În simbolistica Schoenflies grupurile spațiale se notează pur și simplu prin numărul de ordine al grupului în interiorul clasei date. După forma simbolului Schoenflies nu se poate determina simetria unui grup spațial, fiind necesar să se apeleze la tabelele în care sînt comparate simbolurile Schoenflies cu simbolurile internaționale.

După E. S. Fiodorov grupurile spațiale se notează cu numere, avînd indicii s , h , a . s constituie grupurile simorfe: paralel cu axele simple de rotație ale grupului punctual, în grupul spațial se află

* Este vorba despre acele lucrări ale lui E. S. Fiodorov, în care este dată deducerea celor 230 de grupuri spațiale.

** P. Groth — contemporan de-al lui E. S. Fiodorov, autorul unei „Cristalografii” fundamentale (Groth, 1879).

Tabelul 10.2

Regulile de scriere a simbolului unui grup spațial

Singonia	Poziția			
	I	II	III	IV
Triclinică	Tipul de rețea Bravais	Elementul de simetrie conținut		
Monoclinică		Elementul de simetrie conținut	Plan normal la axa 2	
		2 sau 2 ₁		
Rombică		Plan normal la, sau axă paralelă cu		
		axa X	axa Y	axa Z
Tetragonală Hexagonală		Axă de ordin superior (sau plan normal la ea)	Plan sau axă de coordonate	Plan sau axă diagonală
Cubică		Planuri sau axe de coordonate	3	Planuri sau axe diagonale

axe simple sau elicoidale de același ordin, în paralel cu planurile m ale grupului punctual, în grupul spațial planuri m sau planuri de reflexie cu alunecare. Elementele de simetrie similare se intersectează într-un singur punct. h sînt grupurile hemisimorfe: paralel cu toate axele de rotație ale grupului punctual de simetrie se află axe de simetrie de rotație sau elicoidale de același fel, pe cînd paralel cu planurile m ale grupului punctual, în grupul spațial există numai planuri de reflexie cu alunecare. Axele similare se intersectează într-un singur punct. a constituie grupurile asimorfe: cel puțin unul dintre sistemele de axe ale grupului spațial, paralele cu axele de simetrie corespunzătoare, este format numai din axe elicoidale.

Ca și la simbolul grupului punctual, într-un simbol al unui grup spațial se scriu numai elementele de simetrie generatoare. Ordinea scrierii are o valoare esențială. Într-un simbol al unui grup spațial pe primul loc se află totdeauna simbolul rețelei Bravais. În continuare urmează elementele de simetrie generatoare, fiecare într-o ordine strict determinată (tab. 10.2).

Din regulile de scriere a simbolurilor din singonia rombică și singoniile categoriei medii reiese clar de ce se deosebesc elemente de simetrie de coordonate de cele diagonale, în simbolurile grupului punctual, ca de pildă $4mm$, sau $6mm$. Din teoremele 8 și 9, § 9, se vede că adăugarea translației la elementele de simetrie de coordonate și la cele diagonale nu mai are aceeași valoare. Din această cauză, în simbolul elementului punctual aceste două posibilități sînt specificate.

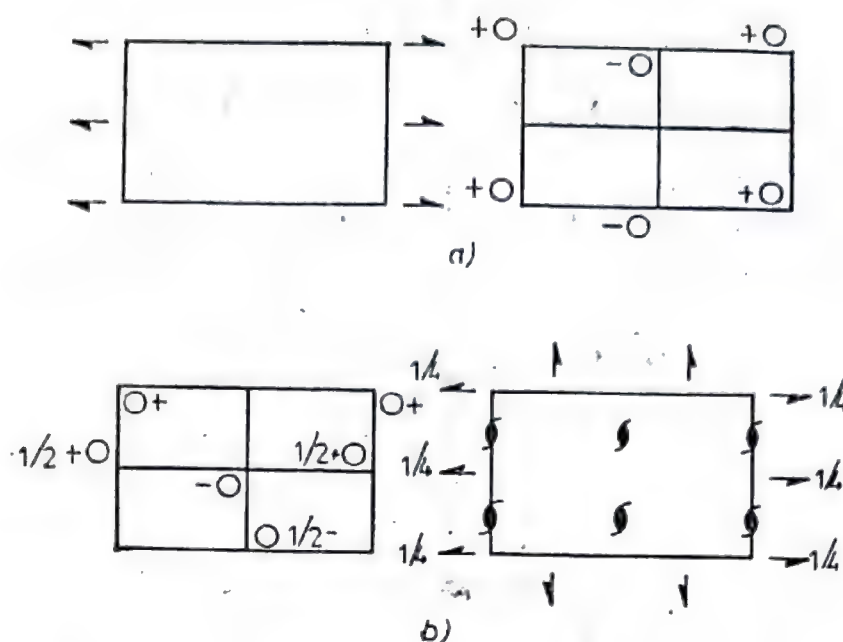


Fig. 10.1. Grupurile spațiale $P2_1$ (a) și $P2_12_12$ (b), care caracterizează modificarea simetriei sării Seignette în cadrul tranziției de fază.

Într-un simbol al grupurilor singoniei cubice, întotdeauna există cifra 3, care se află pe locul al treilea. Ea înseamnă prezența obligatorie în această singonie a patru axe 3. Această cifră se scrie pe locul al treilea și nu pe al doilea, spre deosebire de simbolul singoniei trigonale, unde cifra 3 pe locul al doilea înseamnă o singură axă 3.

Absența unui element de simetrie în poziția respectivă se notează cu cifra 1.

Să discutăm câteva exemple.

Grupul punctual 2. Conform tabelului 9.1, în singonia monoclinică sînt posibile celulele Bravais P și I . Produsul dintre singura operație de simetrie, 2, și translația t dă o axă elicoidală $2_1 : 2 \cdot t = 2_1$. Conform teoremei 10, translațiile unei celule P în combinații cu axele 2 sau 2_1 generează axe intercalate, de același nume, iar conform teoremei 12, translațiile unei celule I generează axe 2 și 2_1 , care alternează. Astfel se obțin trei grupuri spațiale: $P2$, $P2_1$, $I2$. Deoarece axele elicoidale sînt neutre, toate aceste grupuri spațiale sînt și ele neutre. Axa 2 sau 2_1 este polară. Grupul spațial $P2_1$ este caracteristic structurii sării Seignette în faza seignetoelectrică.

La temperatura de -18°C sau $+24^\circ\text{C}$, sarea Seignette trece din faza monoclinică seignetoelectrică în faza paraelectrică, rombică, caracterizată prin grupul spațial $P2_12_12$. În figura 10.1 sînt reprezentate aceste grupuri în aranjare standard: axele elicoidale 2_1 se află în planul XY , fiind notate cu săgeți.

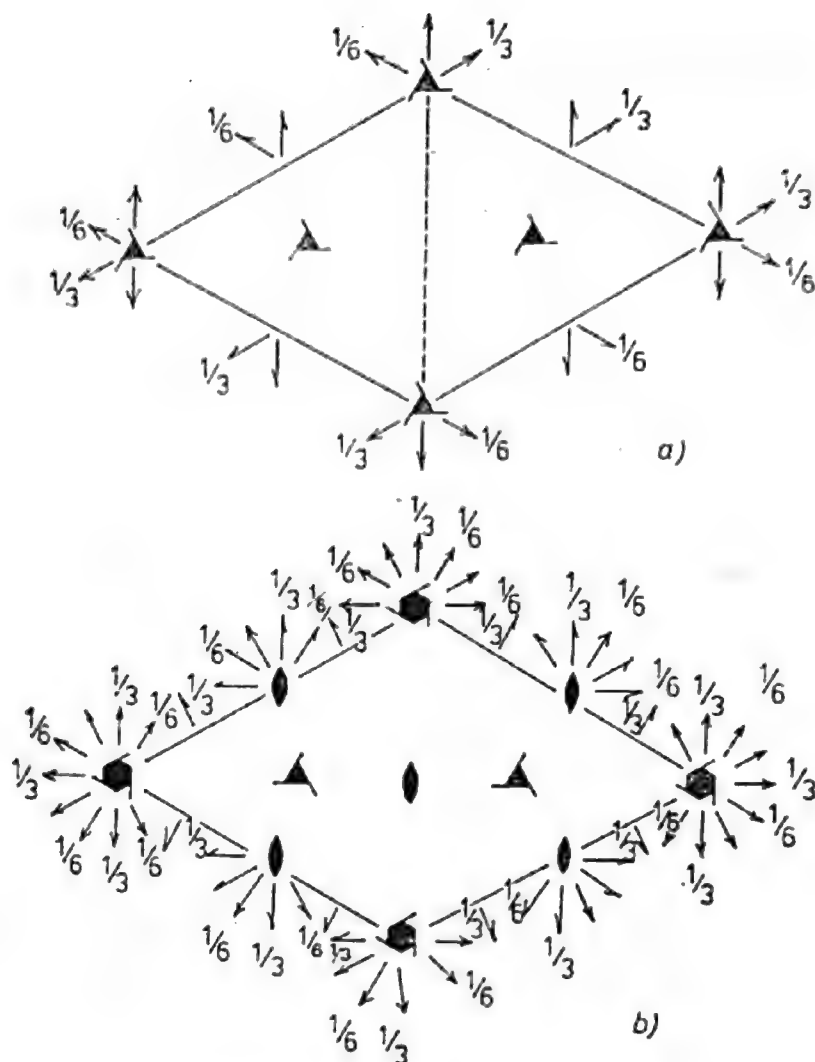


Fig. 10.2. Grupurile spațiale $P3_121$ (a) și $R6_222$ (b), care caracterizează modificarea simetriei cuarțului în cadrul tranziției de fază.

Grupului punctual de simetrie al cuarțului, 32, îi aparțin, corespunzător, grupurile spațiale

$P321$	$P3_121$	$P3_221$
$P312$	$P3_112$	$P3_212$
	$R32$	

În grupurile spațiale enumerate în prima linie translațiile cele mai mici din planul bazei sînt paralele cu axele 2, iar în grupurile enumerate în grupa a doua formează cu ele unghiuri de 60° .

Grupul spațial al structurii de tipul cuarțului, $P3_121$ sau $P3_221$, poate fi drept sau stîng, ceea ce are drept consecință existența cristalelor de cuarț enantiomorfe drepte sau stîngi (fig. 3.9) și prezența la ele a fenomenului de rotire a planului de polarizare. O asemenea structură o are cuarțul de temperatură joasă, de tipul α ; peste $+573^\circ\text{C}$ el trece în modificarea de temperatură înaltă, β ,

avind clasa 622. În acest caz, cuarțul de tipul α trece tot în cuarț drept, de tipul β ($P6_222$), iar cel stâng ($P3_121$), în stâng ($P6_422$) (fig. 10.2). Totodată, axele 2 își pierd polaritatea.

În îndreptarul internațional „Tabele internaționale” (*International Tables*, 1952), sînt date desenele și simbolurile tuturor celor 230 grupuri spațiale. Simbolurile internaționale date în prima ediției a „Tabelor internaționale” (simboluri vechi) se deosebesc întrucîtva de cele adoptate azi, așa-numitele simboluri „noi”. Desenele sînt făcute folosind notațiile convenționale, date în tabelul 3.1.

Odată cu schemele de aranjare a elementelor de simetrie, în „Tabelele internaționale”, pentru fiecare grup spațial sînt date coordonatele și schemele sistemelor regulate de puncte. Se numește *sistem regulat de puncte* totalitatea punctelor legate între ele prin elementele de simetrie ale grupului spațial. Un sistem regulat de puncte se poate obține dintr-un singur punct, repetîndu-l prin aplicarea tuturor elementelor de simetrie ale grupului spațial.

§ 11. BAZA VECTORIALĂ RECIPROCĂ ȘI REȚEAUA RECIPROCĂ

Pe lîngă baza fundamentală, a_1, a_2, a_3 , în cristalografie se utilizează baza vectorială reciprocă, care constă tot din trei vectori, pe care-i vom nota cu aceeași literă, a , dar cu indicii sus: a^1, a^2, a^3 , numindu-i *vectori contravarianți ai bazei*, sau *vectorii bazei rețelei reciproce*. Acești vectori sînt definiți ca soluție a următorului sistem de 9 ecuații liniare, care îi leagă de vectorii obișnuiți, sau vectorii covarianți ai bazei (aici și în continuare, produsul scalar va fi notat cu punct (\cdot) , iar produsul vectorial cu semnul „ori” (\times))

$$\begin{aligned} a_1 \cdot a^1 &= 1, & a_2 \cdot a^1 &= 0, & a_3 \cdot a^1 &= 0, \\ a_1 \cdot a^2 &= 0, & a_2 \cdot a^2 &= 1, & a_3 \cdot a^2 &= 0, \\ a_1 \cdot a^3 &= 0, & a_2 \cdot a^3 &= 0, & a_3 \cdot a^3 &= 1. \end{aligned}$$

Dacă introducem simbolul lui Kronecker

$$\delta_{\alpha}^{\beta} = \begin{cases} 1 & \text{cînd } \beta = \alpha, \\ 0 & \text{cînd } \beta \neq \alpha, \end{cases} \quad (11.1)$$

atunci acest sistem de ecuații se poate scrie într-o formă concisă

$$a_{\alpha} \cdot a^{\beta} = \delta_{\alpha}^{\beta}. \quad (11.2)$$

Sistemul (11.2) arată că orice vector contravariant al bazei (să zicem \mathbf{a}^1) este perpendicular pe ambii vectori covarianți ai bazei, indexați cu celelalte cifre (în cazul de sus, vectorii \mathbf{a}_2 și \mathbf{a}_3) și face un unghi ascuțit cu vectorul de bază covariant de același indice (cu vectorul \mathbf{a}_1). Într-adevăr, cînd produsul scalar a doi vectori este egal cu zero, aceștia sînt perpendiculari între ei; dacă același produs este pozitiv, unghiul dintre vectori este mai mic decît unghiul drept. Deoarece vectorul \mathbf{a}^1 este perpendicular pe vectorul \mathbf{a}_2 și pe vectorul \mathbf{a}_3 , el va fi coliniar cu produsul vectorial al vectorilor \mathbf{a}_2 și \mathbf{a}_3

$$\mathbf{a}^1 = m \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3,$$

unde m este un anumit număr, deocamdată necunoscut. Pentru a-l determina vom înlocui în produsul $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}^1$ mărimea lui \mathbf{a}^1 din expresia

$$m \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = 1.$$

Vom ține seama acum că volumul unei celule elementare, construită pe vectorii \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 , este egal cu

$$v = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3). \quad (11.3)$$

De aici, $m = 1/v$. Calculînd în același mod pe \mathbf{a}^2 și pe \mathbf{a}^3 , obținem

$$\mathbf{a}^1 = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{v}, \quad \mathbf{a}^2 = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{v}, \quad \mathbf{a}^3 = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{v}. \quad (11.4)$$

Formulele (11.4) arată că vectorii bazei rețelei reciproce, \mathbf{a}^1 , \mathbf{a}^2 , \mathbf{a}^3 , sînt orientați după normalele la planurile de coordonate ale rețelei cristaline. Lungimile lor, așa cum se va arăta mai jos, sînt egale cu inversul distanțelor dintre planurile rețelelor de coordonate plane.

Să calculăm produsul mixt al vectorilor contravarianți ai bazei $\mathbf{a}^1 \cdot (\mathbf{a}^2 \times \mathbf{a}^3)$. Aplicînd formula cunoscută, a produsului dublu vectorial,

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{C} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \cdot \mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \cdot \mathbf{A},$$

vom obține

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^2 \times \mathbf{a}^3 &= (1/v^2) (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \times (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) = \\ &= (1/v^2) \{ [\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)] \mathbf{a}_1 - [\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)] \mathbf{a}_3 \} = (1/v) \mathbf{a}_1, \end{aligned}$$

deoarece al doilea termen este egal cu zero. Observînd apoi că

$$\mathbf{a}^1 \cdot \mathbf{a}_1 = 1,$$

găsim, în sfîrșit,

$$\mathbf{a}^1 \cdot (\mathbf{a}^2 \times \mathbf{a}^3) = 1/v. \quad (11.5)$$

De aici rezultă că vectorii contravarianți ai bazei, $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$, formează un triplet drept (deoarece produsul lor mixt este pozitiv).

Notînd că în ecuațiile fundamentale (11.2) vectorii co- și contravarianți ai bazei intră absolut simetric, se pot imediat scrie, prin analogie cu (11.4), formulele care permit exprimarea vectorilor covarianți ai bazei prin cei contravarianți

$$\mathbf{a}_1 = v \mathbf{a}^2 \times \mathbf{a}^3, \quad \mathbf{a}_2 = v \mathbf{a}^3 \times \mathbf{a}^1, \quad \mathbf{a}_3 = v \mathbf{a}^1 \times \mathbf{a}^2 \quad (11.6)$$

(pe primul dintre ei, de fapt, l-am și obținut deja, cu ocazia calculării produsului mixt dintre vectorii contravarianți ai bazei).

Vectorii fundamentali ai rețelei reciproce, adică vectorii contravarianți ai bazei, $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$, ca, de fapt, orice vectori, se pot descompune după baza fundamentală (covariantă), $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$,

$$\mathbf{a}^1 = g^{11}\mathbf{a}_1 + g^{12}\mathbf{a}_2 + g^{13}\mathbf{a}_3,$$

$$\mathbf{a}^2 = g^{21}\mathbf{a}_1 + g^{22}\mathbf{a}_2 + g^{23}\mathbf{a}_3,$$

$$\mathbf{a}^3 = g^{31}\mathbf{a}_1 + g^{32}\mathbf{a}_2 + g^{33}\mathbf{a}_3.$$

Numerele de la coeficienții dezvoltării, g , nu sînt exponenți, ci indici; primul dintre ei este numărul (indicele) vectorului ce se descompune, iar cel de al doilea, indicele vectorului după care se descompune. Aceste trei descompuneri pot fi scrise și concis, utilizînd indici literali și semnul sumei

$$\mathbf{a}^\alpha = \sum_{\beta=1}^3 g^{\alpha\beta} \mathbf{a}_\beta \quad (\alpha = 1, 2, 3),$$

dar și mai laconică este scrierea lor folosind regula de însumare a lui Einstein

$$\mathbf{a}^\alpha = g^{\alpha\beta} \mathbf{a}_\beta. \quad (11.7)$$

În această scriere, însumarea este indicată prin faptul că indicele β —indicele de însumare — apare de două ori: atît sus cît și jos. Cînd într-un „monom” apar doi indici notați cu aceeași

literă a alfabetului grecesc, unul superior și celălalt inferior, acesta nu mai este monom, ci suma monoamelor în care indicii de însumare ia succesiv valorile 1, 2, 3; cazurile în care indicii au alte valori vor fi menționate expres.

Coeficienții descompunerii, $g^{\alpha\beta}$ se numesc *componentele contravariante ale tensorului metric*. Pentru a înțelege sensul lor, înmulțim scalar membrul din dreapta și din stînga ai egalității (11.7) cu un vector contravariant al bazei, oarecare, a^γ . Ținînd cont de faptul că

$$a_\beta \cdot a^\gamma = \delta_\beta^\gamma,$$

obținem

$$a^\alpha \cdot a^\gamma = g^{\alpha\gamma}. \quad (11.8)$$

Astfel, componentele contravariante ale tensorului metric sînt egale cu produsele scalare ale vectorilor contravarianți corespunzători ai bazei. Deoarece produsul scalar al vectorilor este comutativ, adică rezultatul lor nu depinde de ordinea factorilor, aceste componente nu se schimbă la permutarea indicilor

$$g^{\alpha\gamma} = g^{\gamma\alpha}. \quad (11.9)$$

Să examinăm acum descompunerea vectorilor fundamentali ai rețelei, a_1, a_2, a_3 , după vectorii fundamentali ai rețelei reciproce, a^1, a^2, a^3 ,

$$a_\alpha = g_{\alpha\beta} a^\beta. \quad (11.10)$$

Coeficienții acestei dezvoltări, $g_{\alpha\beta}$, se numesc *componentele covariante ale tensorului metric*. Ele sînt egale cu produsele scalare ale vectorilor fundamentali corespunzători, ai rețelei cristaline,

$$g_{\alpha\gamma} = a_\alpha \cdot a_\gamma. \quad (11.11)$$

Este limpede că și ei rămîn neschimbați la permutarea indicilor

$$g_{\alpha\gamma} = g_{\gamma\alpha}. \quad (11.12)$$

Ansamblurile numerelor $g_{\alpha\beta}$ și $g^{\alpha\beta}$ reprezintă niște matrice: compararea egalităților (11.7) și (11.8) arată că aceste matrice sînt una inversa celeilalte. Dacă notăm $\|g_{\alpha\beta}\| = G$, atunci $\|g^{\alpha\beta}\| = G^{-1}$, fiind valabile relațiile

$$g_{\alpha\beta} g^{\beta\gamma} = \delta_\alpha^\gamma. \quad (11.13)$$

Din formulele (11.11) rezultă că componentele covariante ale tensorului metric, $g_{\alpha\beta}$, sînt complet determinate de parametrii celulei — lungimile muchiilor și unghiurile dintre muchii. Dacă notăm lungimile muchiilor cu a, b, c , iar unghiurile dintre ele cu α, β, γ (v. fig. 1.7), atunci

$$G = \begin{vmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ca \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \gamma & bc \cos \alpha & c^2 \end{vmatrix}. \quad (11.14)$$

Apoi, cunoscînd componentele covariante ale tensorului metric, nu este prea greu să calculăm parametrii celulei

$$a = \sqrt{g_{11}}, \quad b = \sqrt{g_{22}}, \quad c = \sqrt{g_{33}},$$

$$\alpha = \arccos \frac{g_{23}}{\sqrt{g_{22}g_{33}}}, \quad \beta = \arccos \frac{g_{31}}{\sqrt{g_{33}g_{11}}}, \quad (11.15)$$

$$\gamma = \arccos \frac{g_{12}}{\sqrt{g_{11}g_{22}}}.$$

După cum s-a demonstrat în § 15, volumul celulei elementare este

$$v = \sqrt{\det G^{-1}};$$

comparînd această egalitate cu (11.14), obținem

$$v = abc \omega,$$

$$\omega = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}. \quad (11.16)$$

Componentele contravariante ale tensorului metric constituie matricea

$$G^{-1} = \begin{vmatrix} a^{*2} & a^*b^* \cos \gamma^* & c^*a^* \cos \beta^* \\ a^*b^* \cos \gamma^* & b^{*2} & b^*c^* \cos \alpha^* \\ c^*a^* \cos \beta^* & b^*c^* \cos \alpha^* & c^{*2} \end{vmatrix}, \quad (11.17)$$

în care a^*, b^*, c^* sînt lungimile muchiilor celulei rețelei reciproce, iar $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$, unghiurile dintre ele. Aceste mărimi se calculează în funcție de componentele contravariante ale tensorului metric,

cu ajutorul unor formule complet analoage cu (11.15), fiind legate de parametrii rețelei cristaline prin relațiile

$$a^* = \frac{\sin \alpha}{a \sin \beta \sin \gamma}, \quad b^* = \frac{\sin \beta}{b \sin \alpha \sin \gamma}, \quad c^* = \frac{\sin \gamma}{c \sin \alpha \sin \beta}, \quad (11.18)$$

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, \quad \cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha},$$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}.$$

Pentru toate cele 14 rețele Bravais (cînd celula elementară a fiecăreia dintre ele se ia ca de obicei), matricele G și G^{-1} sînt date în anexa B.

Paralelipipedul construit pe vectorii contravarianți ai bazei, a^1, a^2, a^3 , se numește *celulă a rețelei reciproce*; rețeaua reciprocă este construită din astfel de paralelipipe.

Fiecărui plan al rețelei directe îi corespunde în spațiul reciproc un nod al rețelei reciproce. Unei familii infinite de planuri paralele din spațiul direct îi corespunde în spațiul reciproc o familie infinită de puncte după o direcție normală la aceste planuri. Rețeaua directă și rețeaua reciprocă sînt reciproc conjugate, avînd aceeași simetrie punctuală (grupurile lor spațiale sînt însă, în general vorbind, diferite).

Cu ajutorul rețelei reciproce se poate descrie distribuția periodică a capacității cristalului de reflectare a radiațiilor Röntgen. Ecuația fundamentală a difracției radiațiilor Röntgen în cristale (formula Wulf-Bragg -- 1913) stabilește dependența dintre lungimea de undă, λ , și distanța d dintre planuri pentru seria de planuri ale rețelei, paralele cu planul de reflexie, ordinul n al spectrului de difracție, dat de această serie de planuri, și unghiul de incidență a undei pe cristal

$$2 d \sin \theta = n \lambda. \quad (11.19)$$

Aici θ este unghiul dintre direcția radiației incidente și planul atomic.

Distanțele dintre planurile de coordonate (100), (010) și (001) sînt inversele lungimilor muchiilor celulei rețelei reciproce a^*, b^*, c^* și se determină cu ajutorul relațiilor (11.18); în cazul general

însă, distanța dintre planuri se determină cu ajutorul relației (15.30) (v. § 15).

Direcția vectorului rețelei reciproce, r^* , coincide cu direcția de reflexie Röntgen pe seria de planuri paralele ale rețelei directe, iar al n -lea nod dintr-un șir al rețelei reciproce corespunde reflexiei de ordinul n pe această serie de planuri. Fiecare nod al rețelei reciproce corespunde unei direcții a fasciculului de radiații Röntgen obținut prin difracții pe seria de planuri paralele ale rețelei.

§ 12. INDEXAREA DIRECȚIILOR ȘI PLANURILOR DIN CRISTALE

În § 1 s-a arătat că pentru fiecare cristal se poate introduce un sistem cristalografic de coordonate, XYZ , construit pe vectorii bazei, a_1, a_2, a_3 , care coincid cu muchiile unei celule elementare. Deoarece vectorii a_1, a_2, a_3 sînt necoplanari, orice vector l poate fi reprezentat sub forma unei combinații liniare și unice a vectorilor bazei

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3. \quad (12.1)$$

Mărimile l^1, l^2, l^3 se numesc componentele vectorului l relativ la baza a_1, a_2, a_3 .

În notația Einstein relația devine

$$l = l^{\alpha} a_{\alpha}. \quad (12.2)$$

Fie ca vectorul $l = l^{\alpha} a_{\alpha}$, avînd componentele l^1, l^2, l^3 numere întregi, să definească o direcție cristalografică. Dacă numerele întregi l^1, l^2, l^3 au un divizor comun, n , se poate introduce un vector de aceeași direcție, însă de n ori mai mic

$$l' = l/n = (l^1/n) a_1 + (l^2/n) a_2 + (l^3/n) a_3;$$

componentele lui vor fi tot numere întregi. Vom considera, de aceea, că împărțirea prin toți divizorii comuni este deja făcută. Componentele l^1, l^2 și l^3 , scrise sub forma $[l^1 l^2 l^3]$, vor fi în acest caz indicii Miller ai direcției cristalografice date, adică ai oricărei drepte orientate, paralelă cu vectorul dat. Așa cum s-a arătat în § 1, indicii unui șir se scriu între paranteze pătrate; de exemplu, simbolurile axelor de coordonate se notează $[110]$, $[010]$, $[001]$.

Totalitatea direcțiilor care pot fi făcute să coincidă simetric între ele, cu ajutorul unor transformări de simetrie, proprii unei

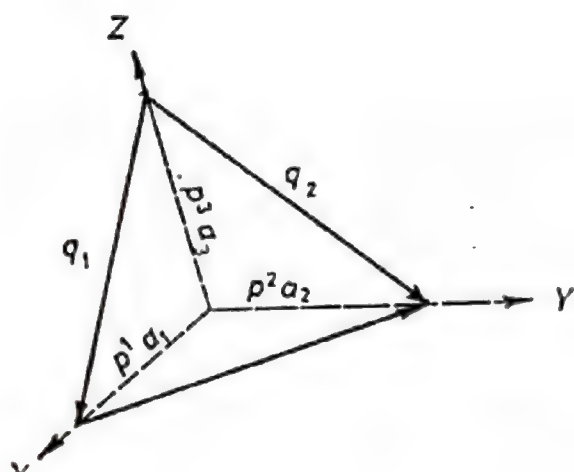


Fig. 12.1. Schemă pentru explicarea simbolului unui plan.

anumite clase de simetrie, se scriu între paranteze de genul următor $\langle \quad \rangle$; de exemplu, totalitatea muchiilor cubului este reprezentată prin $\langle 100 \rangle$, a diagonalelor cubului prin $\langle 111 \rangle$, a diagonalelor fețelor cubului prin $\langle 110 \rangle$. Dacă unele dintre cantitățile l^2 sînt negative, semnul minus se scrie deasupra lor; de pildă, direcția $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (se citește : unu, minus unu, zero). Cînd printre indicii Miller se întîlnesc numere mai mari ca 9, pentru înlăturarea confuziilor, indicii se separă între ei prin puncte; practic însă asemenea direcții cristalografice se întîlnesc extrem de rar.

Dacă celula elementară nu este primitivă, atunci nu orice vector dus din originea axelor de coordonate pînă la un nod al rețelei va avea componentele numere întregi, însă, pentru orice direcție cristalografică poate fi găsit un vector care o definește și ale cărui componente să fie numere întregi; simbolul nodului din centrul unei celule elementare este $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$, însă șirul care trece prin el (diagonala spațială a cubului) poate fi caracterizat prin simbolul $[111]$, dat fiind că el trece prin nodul $[[111]]$.

Orice set de planuri paralele este natural să fie caracterizat prin vectorul normal la ele; dacă acestea sînt planuri cristalografice, adică dacă conțin cel puțin trei noduri ale rețelei cristalografice, necoliniare, ar fi convenabil ca ele să fie caracterizate printr-un vector cu componente numere întregi. Din mulțimea de planuri cristalografice paralele vom alege un plan oarecare, care intersectează axele cristalografice în nodurile rețelei cristaline fără să treacă însă prin originea axelor de coordonate. Poziția planului este determinată univoc prin segmentele numere întregi tăiate de acesta pe axele de coordonate cristalografice (fig. 12.1). Sînt posibile trei cazuri :

1) să existe trei asemenea tăieturi — planul nu este paralel cu nici o axă de coordonate;

2) planul să fie paralel cu una dintre axele de coordonate; el determină două tăieturi numere întregi, pe celelalte două axe;

3) planul să fie paralel cu două axe de coordonate — segmentul este tăiat numai pe a treia axă.

Să examinăm primul caz. Vectorii

$$\mathbf{p}_{(1)} = p^1 \mathbf{a}_1, \mathbf{p}_{(2)} = p^2 \mathbf{a}_2, \mathbf{p}_{(3)} = p^3 \mathbf{a}_3, \quad (12.3)$$

care unesc originea axelor de coordonate cu punctele de intersecție ale planului cu axele, sînt numere întregi. Vectorii

$$\mathbf{q}_{(1)} = \mathbf{p}_{(1)} - \mathbf{p}_{(3)} \text{ și } \mathbf{q}_{(2)} = \mathbf{p}_{(2)} - \mathbf{p}_{(3)} \quad (12.4)$$

sînt, de asemenea, numere întregi; ei se află în planul cristalografic care ne interesează pe noi, produsul lor vectorial fiind perpendicular pe el. Este convenabil să-l împărțim la volumul celulei elementare, v , ceea ce nu-i va schimba, desigur, direcția, iar ordinea factorilor produsului s-o luăm astfel încît acesta să constituie normala exterioară a feței (presupunînd că originea axelor de coordonate se află în interiorul cristalului).

Prin urmare, o față este caracterizată prin vectorul normal pe ea

$$\mathbf{n} = \frac{1}{v} (\mathbf{q}_{(1)} \times \mathbf{q}_{(2)}). \quad (12.5)$$

Să-l calculăm. Substituind în (12.5) expresiile pentru $\mathbf{q}_{(1)}$ și $\mathbf{q}_{(2)}$ din (12.4) și apoi înlocuind vectorii $\mathbf{p}_{(1)}$, $\mathbf{p}_{(2)}$ și $\mathbf{p}_{(3)}$ cu expresiile lor, (12.3), obținem

$$\mathbf{n} = \frac{1}{v} (p^1 \mathbf{a}_1 - p^3 \mathbf{a}_3) \times (p^2 \mathbf{a}_2 - p^3 \mathbf{a}_3).$$

Scriem produsul vectorial dezvoltat

$$\mathbf{n} = \frac{1}{v} (p^1 p^2 \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 + p^3 p^1 \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1 + p^2 p^3 \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3).$$

Remarcăm acum că dacă se împart fiecare dintre termenii produsului vectorial al vectorilor bazei la v , se obțin vectorii bazei rețelei reciproce

$$\mathbf{n} = p^2 p^3 \mathbf{a}^1 + p^3 p^1 \mathbf{a}^2 + p^1 p^2 \mathbf{a}^3. \quad (12.6)$$

Notînd

$$n_1 = p^2 p^3, \quad n_2 = p^3 p^1, \quad n_3 = p^1 p^2,$$

obținem în final

$$\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}^1 + n_2 \mathbf{a}^2 + n_3 \mathbf{a}^3 = n_\alpha \mathbf{a}^\alpha. \quad (12.7)$$

Numerele n_1, n_2, n_3 sînt componentele vectorului \mathbf{n} în raport cu baza reciprocă, $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$. Ca produse ale unor numere întregi ele sînt tot întregi.

Să examinăm acum cel de al doilea caz. Fie, de exemplu, un plan cristalografic paralel cu axa X , iar nodurile rețelei în care el intersectează axele Y și Z au vectorii de poziție exprimați prin numere întregi

$$\mathbf{p}_{(2)} = p^{(2)} \mathbf{a}_2, \quad \mathbf{p}_{(3)} = p^{(3)} \mathbf{a}_3. \quad (12.8)$$

Atunci planul este paralel cu vectorii $\mathbf{a}_{(1)}$ și $\mathbf{q} = \mathbf{p}_{(2)} - \mathbf{p}_{(3)}$, iar vectorul normalei la acest plan poate fi definit cu ajutorul formulei

$$\mathbf{n} = \frac{1}{v} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{q}. \quad (12.9)$$

Efectuînd aceleași calcule ca și în primul caz, găsim

$$\mathbf{n} = p^{(3)} \mathbf{a}^{(2)} + p^{(2)} \mathbf{a}^{(3)} \quad (12.10)$$

și de data aceasta se poate scrie

$$\mathbf{n} = n_\alpha \mathbf{a}^\alpha,$$

unde

$$n_1 = 0, \quad n_2 = p^{(3)}, \quad n_3 = p^{(2)}. \quad (12.11)$$

În sfîrșit, să examinăm un plan cristalografic paralel cu axele X și Y și care intersectează axa Z în partea ei pozitivă. Deoarece planul este paralel cu vectorii \mathbf{a}_1 și \mathbf{a}_2 se poate scrie imediat

$$\mathbf{n} = \frac{1}{v} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}^3. \quad (12.12)$$

În expresia

$$\mathbf{n} = n_\alpha \mathbf{a}^\alpha, \quad n_1 = n_2 = 0, \quad n_3 = 1$$

(dacă planul ar fi intersectat axa Z în jumătatea ei negativă, ar fi trebuit să punem factorii în ordine inversă; atunci $\mathbf{n} = -\mathbf{a}^3$ și, respectiv, $n_3 = -1$).

Prin urmare, un vector normal la o față posibilă sau reală a unui cristal poate fi luat în toate cazurile astfel încât el să aibă componentele întregi în raport cu baza rețelei reciproce. Aceste componente sînt tocmai *indicii Miller ai unei fețe* (v. § 1); ei se notează ca și indicii unei direcții (ai unei muchii), însă nu între paranteze pătrate, ci între paranteze obișnuite ($n_1 n_2 n_3$). Dacă ei au un factor comun, trebuie împărțiți prin acesta (în problemele de analiză structurală röntgenografică nu este totdeauna admis). Cei trei indici între paranteze obișnuite se numesc *indicii feței*.

Indicii Miller ai unei fețe sînt invers proporționali cu componentele vectorilor duși din originea axelor de coordonate în punctele de intersecție ale feței cu axele de coordonate. Într-adevăr, fața dată intersectîndu-se cu toate cele trei axe, din (12.6) rezultă

$$n_1 : n_2 : n_3 = \frac{1}{p^{(1)}} : \frac{1}{p^{(2)}} : \frac{1}{p^{(3)}}. \quad (12.13)$$

iar cînd se intersectează numai cu două dintre axe, să zicem Y și Z , din (12.11) rezultă

$$n_2 : n_3 = \frac{1}{p^{(2)}} : \frac{1}{p^{(3)}}. \quad (12.14)$$

Planurile de coordonate sînt caracterizate prin simbolurile : (100) — YOZ , (010) — ZOX , (001) — XOY .

Prin urmare, s-au introdus două baze vectoriale : baza rețelei, a_1, a_2, a_3 , și baza rețelei reciproce, a^1, a^2, a^3 . S-a arătat că vectorul l , care caracterizează o direcție cristalografică, se poate alege astfel încît componentele lui, l^1, l^2, l^3 , în raport cu baza rețelei să fie numere întregi, iar vectorul normal la planul cristalografic, n , astfel încît componentele lui în raport cu baza rețelei reciproce, n_1, n_2, n_3 , să fie tot numere întregi. Desigur, vectorul l se poate descompune după vectorii bazei rețelei reciproce, iar vectorul n după vectorii bazei directe, pierzîndu-se însă în acest caz caracterul de număr întreg al componentelor și, totodată, valoarea cristalografică a direcției sau planului dat. Așadar, este necesară o anumită pricepere în alegerea bazei, astfel încît să fie convenabilă pentru descrierea obiectului cristalografic.

Demonstrînd că indicii Miller sînt numere întregi pentru planurile cristalografice, am plecat de la conceptul de rețea cristalină. Pînă la apariția analizei structurale röntgenografice și demonstrarea experimentală a caracterului discret al structurii cristalelor, notarea cu indici a fețelor cristalelor s-a bazat pe legea parametrilor raționali (legea raporturilor numerelor raționale întregi), formulată de Haüy, în anul 1781. Împreună cu legea con-

stanței unghiurilor, legea lui Haüy este o lege empirică fundamentală a cristalografiei; ea stabilește legile aranjării fețelor poliedrelor cristaline și explică de ce la cristale apare un anumit fel de fețe.

Legea parametrilor raționali se enunță în modul următor: raporturile duble ale tăieturilor făcute pe cele trei muchii ale unui cristal, luate drept axe de coordonate, dintre a) orice față a cristalului și b) nici una dintre fețele lui, considerată ca față unitară, sînt egale cu raporturi de numere întregi mici.

Să alegem într-un poliedru cristalin trei fețe neparalele și să le considerăm planuri de coordonate, iar muchiile după care se intersectează aceste fețe, axe de coordonate. Să mai luăm încă o față, așa-numită față *unitară*. Fața unitară, neparalelă cu nici una dintre fețele de coordonate, determină pe axele de coordonate tăieturile OA , OB , OC , așa-numiții *parametri ai feței*. Conform legii parametrilor raționali, pentru orice altă față a cristalului, care dă pe axele de coordonate tăieturile OA' , OB' , OC' , raportul dublu este egal cu

$$\frac{OA}{OA'} : \frac{OB}{OB'} : \frac{OC}{OC'} = m : n : p, \quad (12.15)$$

unde m , n , p sînt numere întregi, în majoritatea covârșitoare a cazurilor nedepășind numărul 5. Fețele al căror raport dublu al parametrilor este irațional sînt imposibile pentru un cristal. Dacă raporturile dintre parametri sînt două cîte două simple și întregi, fiind însă numere mari (mai mari ca 5), atunci fața este posibilă, însă extrem de puțin probabilă.

Pentru cristalografie, legea lui Haüy are aceeași valoare ca legea lui Dalton, a raporturilor multiple pentru chimie. Conform legii lui Dalton, nu sînt posibile orice combinații chimice ale elementelor, ci numai acele combinații în care elementele se află în raporturi de numere întregi. Conform legii numerelor întregi, a lui Haüy, pe un poliedru cristalin nu sînt posibile orice fețe, ci numai acele fețe pentru care raporturile duble ale tăieturilor făcute de o față dată și o anumită față „unitară”, sînt egale cu raporturi de numere întregi, mici.

Cu toate că legea parametrilor raționali a fost stabilită numai pe baza analizei formelor exterioare, ale cristalelor și în vremea în care nu existau încă decît cele mai nebuloase ipoteze asupra structurii cristalelor, cu un sfert de secol înaintea formulării legii lui Dalton, ea a fost, în fond, prima lege numerică, care definea structura atomo-moleculară a substanței.

Într-adevăr, ideea legii parametrilor raționali este ușor și simplu de explicat acum, cînd se cunoaște că particulele dintr-un

cristal sînt distribuite în şiruri regulate, care se supun anumitor legi şi că orice muchie a unui cristal corespunde unui şir de particule din reţea. Dacă trei muchii oarecare ale cristalului sînt luate drept axe de coordonate, acest fapt este echivalent cu alegerea drept axe de coordonate a trei translaţii necoplanare din reţea. Deoarece orice faţă a unui cristal corespunde unei structuri reticulare, plane, de noduri ale unei reţele, ea va trebui să treacă şi prin nodurile care se află pe axele X , Y , Z .

În fond, sensul legii lui Haüy se reduce la faptul că feţele unui cristal corespund totdeauna unei reţele plane a reţelei cristaline, iar muchiile cristalului corespund totdeauna unui şir de noduri ale reţelei. Totodată, de regulă, feţele reale ale unui cristal corespund unor reţele plane cu cea mai mare densitate reticulară — prin aceasta explicîndu-se faptul că indicii feţei nu numai că sînt numere întregi, dar sînt şi mici.

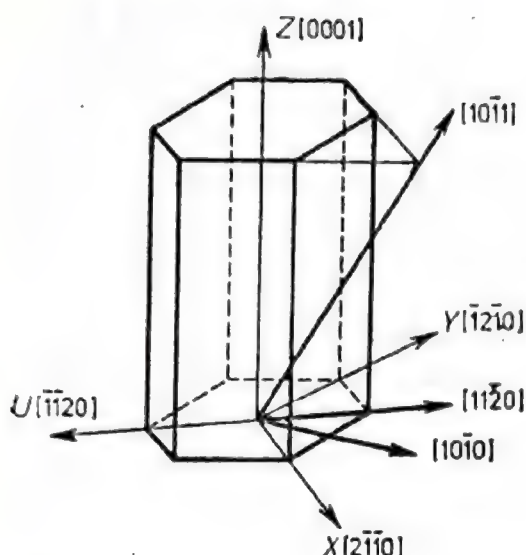
O asemenea interpretare a acestei legi este uşor de dat acum, cînd structura reticulară a cristalelor a fost stabilită experimental şi este bine cunoscută. Cronologic însă a fost străbătut un drum extrem de dificil şi anume, de la observarea formelor exterioare ale poliedrelor cristaline, de la măsurarea unghiurilor de îmbinare a feţelor cristalelor între ele, la primele supoziţii asupra structurii periodice a cristalelor, la teoriile abstracte ale structurii cristalelor, abia ulterior confirmate experimental. Primele reprezentări asupra structurii ordonate a cristalelor au fost emise tocmai în legătură cu legea raporturilor numerelor întregi. Studiul formei poliedrice simetrice a cristalelor a dus la înţelegerea comensurabilităţii interne a structurii lor.

Legea parametrilor raţionali rămîne valabilă chiar dacă axele de coordonate luate după muchiile poliedrului cristalin nu corespund muchiilor celulei elementare. Oricum, aceste muchii trebuie să fie paralele cu nişte şiruri oarecare de puncte ale reţelei, distanţa dintre ele fiind inevitabil împărţită în segmente egale de către sistemele de planuri paralele, cu care sînt paralele fiecare dintre feţele cristalului.

Din legea parametrilor raţionali rezultă, în particular, că orice faţă a unui cristal şi orice plan reticular din reţeaua cristalină pot fi definite prin trei numere întregi, mici, dacă drept axe de coordonate se aleg direcţiile a trei muchii ale cristalului, iar ca unităţi de măsură pe aceste axe se iau segmentele pe care le taie pe aceste axe una dintre feţele cristalului.

În principiu, cu ajutorul indicilor Miller pot fi definite planurile şi direcţiile cristalografice din orice cristale. Cristalografii nu utilizează însă indicii Miller raportaţi la sistemul hexagonal de coordonate, ci preferă indicii Bravais (pentru descrierea cristalelor din sistemul trigonal, uneori se utilizează şi indicii Miller, însă

Fig. 12.2. Simbolurile direcțiilor principale dintr-o celulă hexagonală.



raportați nu la sistemul hexagonal, ci la sistemul de coordonate romboedric — vezi § 13). Aceasta se explică prin tendința de a caracteriza planurile și direcțiile simetric echivalente folosind un set de indici, într-un anumit sens „asemănători”, pe când indicii Miller, raportați la un sistem de coordonate hexagonal nu posedă această proprietate. Astfel, vectorii a_1 , a_2 și $-a_1 - a_2$ definesc direcții simetric echivalente, pe când indicii Miller ai două dintre ele, $[100]$ și $[010]$, se deosebesc esențial de indicii Miller ai celei de a treia direcții, $[\bar{1}\bar{1}0]$.

Pentru a pune complet în evidență simetria cristalelor singoniei hexagonale, se utilizează un sistem de coordonate cu patru axe: în planul de bază, suplimentar față de axele X și Y , orientate după a_1 și, respectiv, a_2 , se introduce încă o axă, U , orientată după vectorul $-a_1 - a_2$. După axa de simetrie principală este orientat ca și pînă acum vectorul a_3 și deci și axa Z (fig. 12.2). Planurile și direcțiile cristalografice sînt caracterizate acum prin orientarea față de toate cele patru axe și, corespunzător acestora, prin patru indici, care se numesc *indici Bravais*. Suma primilor trei indici Bravais este totdeauna egală cu zero.

Indicii Bravais ai unei direcții cristalografice, l , sînt tocmai coeficienții descompunerii vectorului l după cei patru vectori, a_1 , a_2 , $-a_1 - a_2$, a_3 , cu condiția ca suma primilor trei coeficienți să fie egală cu zero. Din această definiție rezultă procedeul de trecere de la scrierea vectorială obișnuită la indicii Bravais. Vectorul unei direcții cristalografice,

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3 \quad (12.16)$$

(l^1 , l^2 , l^3 fiind numere întregi) poate fi scris sub forma

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + 0 (-a_1 - a_2) + l^3 a_3.$$

Numerele $l^1, l^2, 0, l^3$ se deosebesc de indicii Bravais numai prin faptul că suma primelor trei numere nu este egală cu zero. Să adăugăm la vectorul l vectorul

$$m = ma_1 + ma_2 + m(-a_1 - a_2) = 0.$$

Evident,

$$l + m = (l^1 + m)a_1 + (l^2 + m)a_2 + m(-a_1 - a_2) + l^3a_3 = l.$$

Să punem

$$m = -(l^1 + l^2)/3,$$

atunci suma primilor trei indici devine, așa cum se și cere, egală cu zero. Pentru ca indicii să fie numere întregi, înmulțim toți coeficienții cu 3. Prin urmare, pentru direcția cristalografică

$$l = l^1a_1 + l^2a_2 + l^3a_3$$

indicii Bravais sînt egali cu

$$[2l^1 - l^2, 2l^2 - l^1, -l^1 - l^2, 3l^3]. \quad (12.17)$$

Dacă se constată că indicii Bravais obținuți au un factor comun, firește trebuie simplificați prin acesta. Avînd dați indicii Bravais $[r^1r^2r^3r^4]$ ai unei direcții cristalografice este ușor acum de găsit vectorul l , care o caracterizează. Din definiția indicilor Bravais,

$$l = r^1a_1 + r^2a_2 + r^3(-a_1 - a_2) + r^4a_3.$$

Reducînd termenii asemenea, obținem

$$l = (r^1 - r^3)a_1 + (r^2 - r^3)a_2 + r^4a_3 \quad (12.18)$$

care este tocmai soluția problemei enunțate.

Indicii Bravais pentru direcții simetrice echivalente sînt, într-adevăr, asemănători. De exemplu, axele X, Y și U sînt caracterizate, respectiv, prin simbolurile $[2\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}2\bar{1}0]$ și $[\bar{1}\bar{1}20]$; ele se deosebesc unul de altul numai prin ordinea indicilor (v. fig. 12.2).

Indicii Bravais pentru planurile cristalografice reprezintă coeficienții descompunerii vectorului normalei n la planul cristalografic, după cei patru vectori

$$\frac{2}{3}a^1 - \frac{1}{3}a^2, \quad \frac{2}{3}a^2 - \frac{1}{3}a^1, \quad -\frac{1}{3}a^1 - \frac{1}{3}a^2, \quad a^3, \quad (12.19)$$

iar suma primilor trei coeficienți este egală cu zero. Pentru un plan caracterizat prin vectorul

$$\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}^1 + n_2 \mathbf{a}^2 + n_3 \mathbf{a}^3, \quad (12.20)$$

indicii Bravais sînt

$$(n_1, n_2, -n_1 - n_2, n_3). \quad (12.21)$$

Dimpotrivă, planul cristalografic avînd indicii Bravais

$$(p_1 p_2 p_3 p_4)$$

este caracterizat de vectorul

$$\mathbf{n} = p_1 \mathbf{a}^1 + p_2 \mathbf{a}^2 + p_4 \mathbf{a}^3. \quad (12.22)$$

Conform definiției unanim acceptate în cristalografie, indicii Bravais ai planurilor cristalografice sînt numere întregi prime între ele, invers proporționale cu tăieturile planului dat pe fiecare dintre axele X, Y, U, Z , măsurate în aceleași unități cu axele. Este deci necesar să se demonstreze că atît definiția formală, dată mai sus, pentru indicii Bravais, cit și definiția unanim acceptată, prezentată aici, sînt echivalente.

După cum rezultă din teorema generală, dedusă la începutul acestui paragraf, componentele n_1, n_2, n_3 ale vectorului \mathbf{n} sînt invers proporționale cu segmentele tăiate de planul dat pe axele X, Y și Z . Aceste componente sînt însă egale, respectiv, cu primul, al doilea și al patrulea dintre indicii Bravais. Pe urmă, dacă un plan dat are ca tăieturi pe axele X și Y segmentele d/n_1 și, respectiv, d/n_2 , atunci segmentul tăiat de el pe axa U va fi egal cu $d/(-n_1 - n_2)$. Într-adevăr, să examinăm figura 12.3. Dreapta MN este linia de intersecție a planului bazei cu planul definit de vectorul \mathbf{n} . Planul \mathbf{n} intersectează axele X, Y și U în punctele A, B, C , care se află pe această dreaptă. Evident,

$$OA = \frac{d}{n_1}$$

și

$$OB = \frac{d}{n_2}.$$

Pe axa U este tăiat segmentul OC . Să ducem segmentele $CA' \parallel OB$ și $CB' \parallel OA$. Deoarece

$$\angle AOC = \angle BOC = 60^\circ,$$

§ 13. TRANSFORMAREA INDICILOR LA SCHIMBAREA SISTEMULUI DE COORDONATE

În cristalografie este nevoie destul de rar să se recurgă la transformarea sistemului de coordonate, deoarece se utilizează, de obicei, sisteme standard, bine definite. Totuși, există cazuri în care unul și același cristal poate fi descris în două sisteme de coordonate standard diferite. În particular, cristalele sistemului trigonal sînt descrise uneori nu într-un sistem de coordonate hexagonal, ci într-unul romboedric. Pe lângă aceasta, dacă în cristalografie se utilizează, obișnuit, celulele elementare, chiar dacă nu sînt primitive, în fizica corpului solid sînt preferate, de regulă, celulele primitive. În toate aceste cazuri trecerea de la un mijloc de descriere la altul se efectuează cu ajutorul transformărilor corespunzătoare ale bazei vectoriale a rețelei.

Fie $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ o bază vectorială oarecare a unei rețele cristaline. O vom numi convențional bază „veche” și să considerăm, totodată, o altă bază a rețelei, $\mathbf{a}_1', \mathbf{a}_2', \mathbf{a}_3'$, pe care o vom denumi (tot convențional) bază „nouă”. Corespunzător vom denumi și sistemele de coordonate construite pe aceste baze, „vechi” și „noi”. Cunoșcînd componentele unui vector oarecare în sistemul de coordonate vechi, se pot calcula componentele lui din sistemul nou; această operație, aplicată tuturor vectorilor care figurează în problema de rezolvat, a căpătat numele de *transformare a sistemului de coordonate*, sau trecere de la sistemul de coordonate vechi la cel nou.

Vectorii noii baze se pot descompune, ca orice vector, după baza veche

$$\mathbf{a}_{\beta'} = P_{\beta}^{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}. \quad (13.1)$$

Dacă vectorii bazei vechi definesc o celulă elementară, atunci toți coeficienții P_{β}^{α} sînt numere întregi. Dacă însă paralelipipedul construit pe vectorii bazei vechi nu este elementar, coeficienții P_{β}^{α} nu sînt obligatoriu numere întregi (fiind, în orice caz, raționali).

Deoarece nici vectorii bazei noi nu sînt coplanari, vectorii bazei vechi se pot descompune după noua bază

$$\mathbf{a}_{\alpha} = Q_{\alpha}^{\gamma'} \mathbf{a}_{\gamma'}. \quad (13.2)$$

Pentru a stabili relațiile care leagă coeficienții $Q_{\alpha}^{\gamma'}$ de coeficienții P_{β}^{α} , să substituim expresia (13.2) pentru \mathbf{a}_{α} în formula (13.1)

$$\mathbf{a}_{\beta'} = P_{\beta}^{\alpha} Q_{\alpha}^{\gamma'} \mathbf{a}_{\gamma'}.$$

Fiindcă vectorii fundamentali sînt liniar independenți, din ultima egalitate rezultă

$$P_{\beta'}^{\alpha} Q_{\alpha}^{\gamma'} = \delta_{\beta'}^{\gamma'}. \quad (13.3)$$

Însă se poate proceda și altfel: să înlocuim expresia (13.1) a lui $a_{\beta'}$ în formula (13.2). Obținem drept rezultat egalitatea

$$a_{\gamma} = Q_{\gamma}^{\beta'} P_{\beta'}^{\alpha} a_{\alpha}.$$

În virtutea independenței liniare a vectorilor bazei, rezultă

$$Q_{\gamma}^{\beta'} P_{\beta'}^{\alpha} = \delta_{\gamma}^{\alpha}. \quad (13.4)$$

Seturile de coeficienți $P_{\beta'}^{\alpha}$ și $Q_{\alpha}^{\beta'}$ formează următoarele matrice pătratice

$$P = \begin{vmatrix} P_1^1 & P_1^2 & P_1^3 \\ P_2^1 & P_2^2 & P_2^3 \\ P_3^1 & P_3^2 & P_3^3 \end{vmatrix}, \quad Q = \begin{vmatrix} Q_1^1 & Q_1^2 & Q_1^3 \\ Q_2^1 & Q_2^2 & Q_2^3 \\ Q_3^1 & Q_3^2 & Q_3^3 \end{vmatrix}.$$

Relațiile (13.3) și (13.4) pot fi scrise sub formă de egalități matriceale

$$PQ = I, \quad QP = I. \quad (13.5)$$

Aici

$$I = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (13.6)$$

este *matricea unitate*.

Dacă cele două matrice satisfac una dintre relațiile (13.5), ele satisfac în mod necesar și pe cea de-a doua. Astfel de matrice se numesc *matrice inverse*. Cunoscînd una dintre cele două matrice inverse, să zicem P , se pot obține suficient de simplu elementele celeilalte. Pentru aceasta, trebuie calculat determinantul $\det P$ al matricei P și complementele algebrice, $\Pi_{\alpha}^{\beta'}$, ale elementelor ei. Complementul algebric $\Pi_{\alpha}^{\beta'}$ al elementului $P_{\beta'}^{\alpha}$ al matricei P este egal cu determinantul obținut din determinantul matricei P , prin eliminarea coloanei și liniei care conțin elementul $P_{\beta'}^{\alpha}$ și avînd semnul $(-1)^{\alpha+\beta'}$. Apoi, elementele $Q_{\alpha}^{\beta'}$ ale matricei Q se calculează cu ajutorul formulei

$$Q_{\alpha}^{\beta'} = \frac{1}{\det P} \Pi_{\alpha}^{\beta'}. \quad (13.7)$$

Să introducem simbolurile Levi-Civita

$$\delta_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } \alpha\beta\gamma = 123, 231, 312, \\ -1 & \text{pentru } \alpha\beta\gamma = 132, 213, 321, \\ 0 & \text{în celelalte cazuri}^* \end{cases} \quad (13.8)$$

și $\delta^{\alpha\beta\gamma}$, care se deosebește de precedentul numai prin scrierea indicilor sus. Cu ajutorul simbolurilor introduse, relațiile (11.4) și (11.6) dintre vectorii bazei rețelei directe și ai celei reciproce se scriu într-o formă concisă și elegantă

$$\mathbf{a}^\alpha = \frac{1}{2v} \delta^{\alpha\beta\gamma} \mathbf{a}_\beta \times \mathbf{a}_\gamma, \quad (13.9)$$

$$\mathbf{a}_\alpha = \frac{1}{2} v \delta_{\alpha\beta\gamma} \mathbf{a}^\beta \times \mathbf{a}^\gamma,$$

la fel și formulele pentru produsele vectoriale ale vectorilor bazei

$$\mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{a}_\beta = v \delta_{\alpha\beta\gamma} \mathbf{a}^\gamma, \quad \mathbf{a}^\alpha \times \mathbf{a}^\beta = \frac{1}{v} \delta^{\alpha\beta\gamma} \mathbf{a}_\gamma. \quad (13.10)$$

Simbolurile Levi-Civita permit scrierea foarte concisă a succesiunii operațiilor necesare pentru calcularea determinantului oricărei matrice S de forma (3×3) , având elementele S^α_β

$$\det S = \delta_{\alpha\beta\gamma} S^\alpha_1 S^\beta_2 S^\gamma_3 = \delta^{\alpha\beta\gamma} S^\alpha_1 S^\beta_2 S^\gamma_3. \quad (13.11)$$

Utilizând aceste formule, să calculăm volumul v' al paralelipedului construit pe vectorii bazei noi. Evident,

$$v' = \mathbf{a}_{1'} \cdot (\mathbf{a}_{2'} \times \mathbf{a}_{3'}).$$

Înlocuind vectorii bazei noi cu descompunerile lor, (13.1), obținem

$$v' = P^\alpha_1 P^\beta_2 P^\gamma_3 \mathbf{a}_\alpha \cdot (\mathbf{a}_\beta \times \mathbf{a}_\gamma). \quad (13.12)$$

* Este cunoscută și o altă formă a definiției simbolului Levi-Civita mai compactă, dar, din, păcate mai puțin intuitivă

$$\delta_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2} (\alpha - \beta)(\beta - \gamma)(\gamma - \alpha).$$

Folosind pentru calcularea produsului $\mathbf{a}_\beta \times \mathbf{a}_\gamma$ formula (13.10), și apelînd apoi la formula (11.2), obținem

$$v' = v \delta_{\alpha\beta\gamma} P_1^\alpha P_2^\beta P_3^\gamma. \quad (13.13)$$

Comparînd această expresie cu formula (11.11), ajungem la relația

$$v' = v \det P. \quad (13.14)$$

Rezultă deci că determinantul matricei P este egal cu raportul dintre volumul paralelipipedului construit pe vectorii bazei noi și volumul paralelipipedului construit pe vectorii bazei vechi. Evident,

$$\det Q = v/v'$$

(determinanții matricelor care sînt reciproc inverse sînt reciproc inverși).

Să examinăm acum cum se va transforma baza rețelei reciproce ca urmare a unei transformări date a bazei rețelei cristaline. Evident, noilor vectori covarianți ai bazei, $\mathbf{a}_1', \mathbf{a}_2', \mathbf{a}_3'$, le corespund vectori contravarianți ai bazei noi, $\mathbf{a}^1, \mathbf{a}^2, \mathbf{a}^3$, care sînt dați de relațiile

$$\mathbf{a}^{2'} \cdot \mathbf{a}^{\gamma'} = \delta_{\alpha'}^{\gamma'}. \quad (13.15)$$

Ei se descompun după vectorii vechi, prin intermediul matricei Q

$$\mathbf{a}^{\gamma'} = Q_{\eta}^{\gamma'} \mathbf{a}^{\eta}. \quad (13.16)$$

Într-adevăr, pentru o astfel de lege de transformare,

$$\mathbf{a}_{\alpha'} \cdot \mathbf{a}^{\gamma'} = P_{\alpha_1'}^{\beta} Q_{\eta}^{\gamma'} \cdot \mathbf{a}_{\beta} \cdot \mathbf{a}^{\eta},$$

iar de aici, cu ajutorul relațiilor (11.2) și (13.3) se obține imediat relația (13.15). Este evident că vectorii contravarianți ai bazei vechi se vor descompune după cei noi, prin intermediul matricei

$$\mathbf{a}^{\eta} = P_{\gamma'}^{\eta} \mathbf{a}^{\gamma'}. \quad (13.17)$$

Acum este ușor de înțeles cum se transformă componentele vectorilor rețelei raportați la această bază, în cazul unei transformări date a bazei, adică cum se transformă indicii Miller ai direcțiilor cristalografice (ai muchiilor) și ai planurilor cristalografice

(ai fețelor). Vom analiza mai întâi indicii direcțiilor cristalografice. Pentru orice vector l este valabilă egalitatea

$$l = l^\alpha a_\alpha = l^{\beta'} a_{\beta'}. \quad (13.18)$$

Pentru satisfacerea ei este necesar ca

$$l^{\beta'} = Q_Y^{\beta'} l^\gamma. \quad (13.19)$$

Într-adevăr, în acest caz,

$$l^{\beta'} a_{\beta'} = Q_Y^{\beta'} l^\gamma P_\beta^\alpha a_\alpha,$$

iar de aici, după aplicarea identității (13.4), rezultă că egalitatea (13.18) este satisfăcută în cazul acestei legi de transformare. Invers, componentele vechi, l^α , se pot exprima prin cele noi, prin intermediul matricei P

$$l^\alpha = P_\beta^\alpha l^{\beta'}. \quad (13.20)$$

Complet analog se deduc formulele de transformare pentru indicii fețelor

$$n_{\beta'} = P_\beta^\alpha n_\alpha, \quad (13.21)$$

$$n_\alpha = Q_\alpha^{\beta'} n_{\beta'}. \quad (13.22)$$

Să sintetizăm toate rezultatele obținute în acest paragraf sub forma unui tabel. În acest caz vom numi trecerea de la mărimile vechi la cele noi transformare „directă” — ea este dată de formulele care exprimă mărimile noi prin combinații liniare ale celor vechi. Trecerea de la mărimile noi la cele vechi o vom numi transformare „inversă”. Vom obține atunci următorul tabel

Mărimile	Transformarea directă	Transformarea inversă
Vectorii bazei rețelei, a_α	$a_{\beta'} = P_\beta^\alpha a_\alpha$	$a_\gamma = Q_Y^{\beta'} a_{\beta'}$
Vectorii bazei rețelei reciproce, a^α	$a^{\beta'} = Q_\alpha^{\beta'} a^\alpha$	$a^\gamma = P_\beta^\alpha a^{\beta'}$
Indicii planurilor (fețelor), n_α	$n_{\beta'} = P_\beta^\alpha n_\alpha$	$n_\gamma = Q_Y^{\beta'} n_{\beta'}$
Indicii direcțiilor (muchiiilor), l^α	$l^{\beta'} = Q_\alpha^{\beta'} l^\alpha$	$l^\gamma = P_\beta^\alpha l^{\beta'}$

Acest tabel arată că transformarea directă a mărimilor având indici inferiori — vectorii bazei rețelei, a_α , și indicii fețelor, n_α — se realizează prin intermediul matricei P , iar transformarea inversă,

cu ajutorul matricei Q . Din contră, în cazul mărimilor care au indicii superiori — vectorii bazei rețelei reciproce, a^z , și indicii muchiilor, l^z — transformarea directă este legată de matricea Q , iar cea inversă, de matricea P . Toemai de acest fapt este legată denumirea mărimilor : mărimile cu indicii inferiori se numesc mărimi covariante (vectorii covarianți ai bazei, a_α , componentele covariante, n_α), deoarece ele se transformă la fel ca și baza vectorială fundamentală, pe cînd mărimile cu indicii superiori se numesc mărimi contravariante (vectorii contravarianți ai bazei, a^z , componentele contravariante, l^z), pentru că ele se transformă într-un mod, ca să zicem așa „din contră”.

Denumirile componentelor tensorului metric de „covariante” și „contravariante” amintesc de legile de transformare a acestor componente la trecerea de la o bază la alta. Legile de transformare rezultă direct din formulele (11.8) și (11.11). Dacă pe lîngă baza veche, a_1, a_2, a_3 , se introduce o bază nouă, a_1', a_2', a_3' , atunci, conform expresiilor (11.11), legea de transformare a componentelor covariante ale tensorului metric este dată de relațiile

$$g_{\gamma'\eta'} = P_{\gamma'}^{\alpha} P_{\eta'}^{\beta} g_{\alpha\beta}, \quad (13.23)$$

$$g_{\alpha\beta} = Q_{\alpha}^{\gamma'} Q_{\beta}^{\eta'} g_{\gamma'\eta'}.$$

Să comparăm aceste formule cu legea de transformare a componentelor covariante ale vectorului, (13.21), (13.22). Evident, componentele covariante ale tensorului metric se transformă ca produsul componentelor covariante a doi vectori. Această proprietate se utilizează pentru definirea tensorului. Anume, nouă mărimi $f_{\alpha\beta}$ se numesc *componentele covariante ale tensorului de rangul doi*, dacă ele se transformă ca produsele componentelor covariante a doi vectori. Mai mult decît atît, 3^r mărimi $f_{\alpha_1 \dots \alpha_r}$ se numesc *componentele covariante ale unui tensor de rangul r* , dacă ele se transformă ca produsele componentelor covariante ale r vectori.

În toate aceste afirmații se poate înlocui prefixul „co” prin prefixul „contra”; ca rezultat vom obține definițiile corespunzătoare pentru componentele contravariante ale tensorilor. În particular, din relațiile (13.8), (13.16) și (13.17) se deduce legea de transformare a componentelor contravariante ale tensorului metric

$$g^{\gamma'\eta'} = Q_{\alpha}^{\gamma'} Q_{\beta}^{\eta'} g^{\alpha\beta}, \quad (13.24)$$

$$g^{\alpha\beta} = P_{\gamma'}^{\alpha} P_{\eta'}^{\beta} g^{\gamma'\eta'}.$$

Sînt posibile, de asemenea, și componente mixte ale tensorilor; de exemplu, cele două mărimi f_{α}^{β} se numesc *componente mixte*

(mai exact, o dată covariantă și o dată contravariantă) ale unui tensor de rangul doi, dacă ele se transformă ca produsul dintre componenta covariantă a unui vector și componenta contravariantă a celuilalt vector.

S-a menționat deja (v. § 12) că, în principiu, orice vector se poate descompune atât în raport cu o bază covariantă, cât și în raport cu una contravariantă; în mod corespunzător, acest vector va fi definit prin componentele lui contravariante sau prin cele covariante. O proprietate specifică a tensorului metric constă în faptul că el determină legătura dintre componentele ambelor tipuri, permițând o trecere imediată de la un tip la celălalt.

Fie, de exemplu, vectorul

$$l = l^{\alpha} a_{\alpha}$$

definit inițial prin componentele sale contravariante, l^{α} . Pentru a determina componentele lui covariante, l_{α} , este suficient să descompunem vectorii covarianți ai bazei, a_{α} , după cei contravarianți

$$a_{\alpha} = g_{\alpha\beta} a^{\beta}.$$

Acum avem

$$l = l^{\alpha} g_{\alpha\beta} a^{\beta}.$$

Însă chiar acești coeficienți ai descompunerii vectorului l după baza contravariantă constituie tocmai componentele sale covariante, l_{β} . Deci, componentele covariante și cele contravariante ale unui același vector sînt legate prin relația

$$l_{\beta} = l^{\alpha} g_{\alpha\beta}. \quad (13.25)$$

Analog se deduce expresia

$$n^{\beta} = n_{\alpha} g^{\alpha\beta}, \quad (13.26)$$

care permite exprimarea componentelor contravariante ale unui vector prin componentele sale covariante. Relațiile (13.25) și (13.26) arată că cu ajutorul tensorului metric se pot ridica și coborî indicii. Dacă, în particular, folosim tensorul metric pentru a coborî unul dintre indicii componentelor contravariante chiar ale acestui tensor sau pentru a ridica unul dintre indicii componentelor sale covariante, atunci vom obține componentele mixte (o dată covariante și o dată contravariante) ale tensorului metric

$$g^{\alpha}_{\gamma} = g^{\alpha\beta} g_{\beta\gamma}.$$

Comparînd acest rezultat cu formula (11.13), vedem că

$$g_{\gamma}^{\alpha} = \delta_{\gamma}^{\alpha}, \quad (13.27)$$

adică componentele mixte ale unui tensor metric coincid cu simbolurile Kronecker.

Ca exemplu de transformare a unui sistem de coordonate vom examina trecerea de la sistemul de coordonate romboedric la sistemul hexagonal. În figura 13.1 este reprezentată proiecția unei

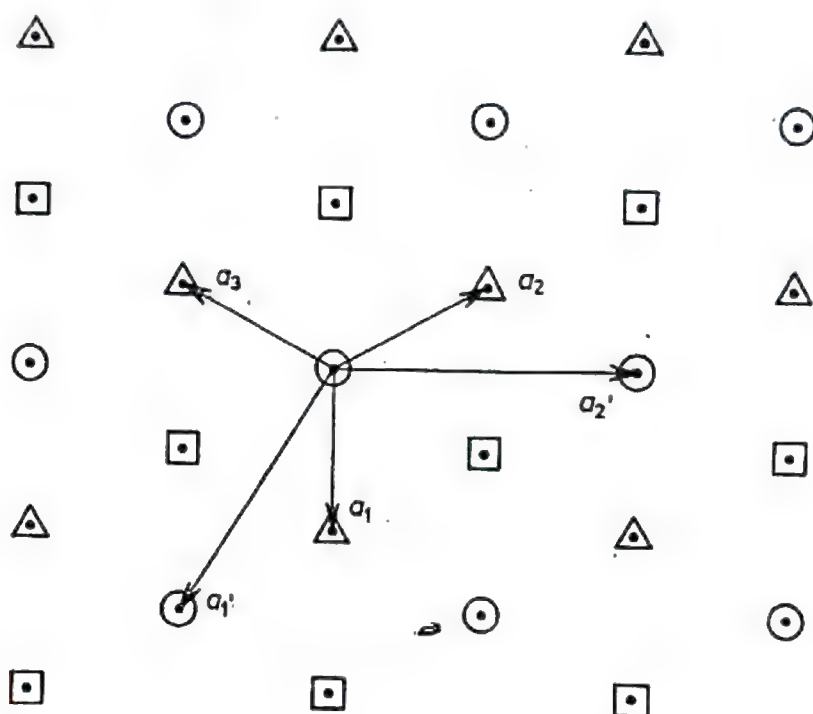


Fig. 13.1. Vectorii bazei sistemelor de coordonare romboedric și hexagonal dintr-o rețea romboedrică. Nodurile notate cu cerceulețe se află în planul desenului, cele însemnate cu triunghiuri — deasupra desenului, iar cele cu pătrate — sub planul desenului.

rețele romboedrice în planul fundamental. Vom considera că nodurile reprezentate prin cerceulețe se află în planul desenului. Immediat deasupra acestui plan sînt dispuse nodurile reprezentate prin triunghiuri, iar imediat sub același plan, nodurile reprezentate prin pătrate. Întregul tablou se repetă periodic: astfel, imediat deasupra planului nodurilor notate cu triunghiuri se află planul nodurilor marcate cu pătrate, iar următorul deasupra acestui plan va fi planul nodurilor notate cu cerceulețe.

Vectorii bazei sistemului de coordonate romboedric, a_1 , a_2 , a_3 , pleacă dintr-un nod, care se află în planul desenului, spre nodurile cele mai apropiate din planul care se află imediat deasupra planului desenului.

Vectorii bazei sistemului de coordonate hexagonal, a_1 și a_2 , se află în planul desenului. Cel de al treilea dintre ei, a_3 , nu este reprezentat în desen, deoarece el este perpendicular pe planul desenului; acest vector este orientat dinspre nodul origine spre nodul cel mai apropiat, ce se află imediat deasupra planului desenului.

Din figura 13.1 rezultă clar relațiile care leagă vectorii bazei ambelor sisteme. Anume

$$\begin{aligned} a_1' &= a_1 - a_2, \\ a_2' &= a_2 - a_3, \\ a_3' &= a_1 + a_2 + a_3. \end{aligned} \quad (13.28)$$

Prin urmare, matricea $\|P_{\beta}^{\alpha}\|$, care definește trecerea de la baza romboedrică la cea hexagonală, este de forma

$$\begin{array}{c|ccc} & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1' & 1 & -1 & 0 \\ 2' & 0 & 1 & -1 \\ 3' & 1 & 1 & 1 \end{array} \quad (13.29)$$

Determinantul matricei este $\det P = 3$; aceasta arată că volumul celulei hexagonale este de trei ori mai mare decât cel al celulei romboedrice.

Matricea transformării inverse, $\|Q_{\beta}^{\alpha}\|$, conform relației (13.7), este egală cu

$$\begin{array}{c|ccc} & 1' & 2' & 3' \\ \hline 1 & 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ 2 & -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 3 & -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{array} \quad (13.30)$$

Rezultă că vectorii bazei romboedrice se descompun după vectorii bazei hexagonale astfel

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{3} (2a_1' + a_2' + a_3'), \\ a_2 &= \frac{1}{3} (-a_1' + a_2' + a_3'), \\ a_3 &= \frac{1}{3} (-a_1' - 2a_2' + a_3'). \end{aligned} \quad (13.31)$$

Aşa cum s-a remarcat deja, cristalele sistemelor trigonal şi hexagonal sînt desemnate acum cu ajutorul indicilor Bravais ; însă aceştia din urmă sînt legaţi de sistemul de coordonate hexagonal. Dar, demult, pentru reprezentarea cristalelor sistemului trigonal erau preferaţi indicii Miller, legaţi de sistemul de coordonate romboedric — un astfel de procedeu a şi fost utilizat de cunoscutul cristalograf P. Groth în elasicul său îndrumar (Groth, 1897) ; de altfel, unii îi mai utilizează cîteodată chiar şi în zilele noastre. Subliniem faptul că Groth a folosit indicii Miller nu numai pentru desemnarea cristalelor care au reţeaua Bravais romboedrică, ci şi pentru cristalele sistemului trigonal, a căror reţea Bravais este hexagonală. În acest ultim caz, celula romboedrică trebuie considerată drept celulă elementară, însă nu primitivă, celulă primitivă fiind celula hexagonală.

Pentru a elucida şi în acest caz legătura dintre baza romboedrică şi cea hexagonală, ne vom referi din nou la figura 13.1. Să ne imaginăm că nodurile însemnate cu triunghiuri şi cele cu pătrate lipsesc. Nodurile rămase, cele notate cu cerceuleţe, vor forma reţeaua Bravais hexagonală ; celula sa elementară este definită de vectorii \mathbf{a}_1' , \mathbf{a}_2' , \mathbf{a}_3' . Să remarcăm acum că vectorii $3\mathbf{a}_1$, $3\mathbf{a}_2$ şi $3\mathbf{a}_3$ sînt vectorii reţelei Bravais hexagonale, astfel obţinute. Ei sînt, evident, tocmai cei care definesc celula elementară romboedrică ; după cum se poate vedea uşor, volumul acesteia este de trei ori mai mare decît volumul celulei primitive hexagonale.

Să stabilim relaţiile dintre indicii Bravais, legaţi de sistemul de coordonate hexagonal, şi indicii Miller, legaţi de sistemul de coordonate romboedric. Să începem cu simbolurile direcţiilor (muchiiilor). Fie direcţia cristalografică definită de indicii Bravais $[r^1 r^2 r^3 r^4]$. Conform formulei (12.19), vectorul corespunzător este

$$\mathbf{l} = (r^1 - r^3) \mathbf{a}_1' + (r^2 - r^3) \mathbf{a}_2' + r^4 \mathbf{a}_3'.$$

Folosind relaţia (13.23), vom descompune vectorii bazei sistemului de coordonate hexagonal, \mathbf{a}_1' , \mathbf{a}_2' , \mathbf{a}_3' , după baza sistemului de coordonate romboedric

$$\mathbf{l} = (r^1 - r^3) (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) + (r^2 - r^3) (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3) + r^4 (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3).$$

După reducerea termenilor asemenea, obţinem

$$\mathbf{l} = (r^1 - r^3 + r^4) \mathbf{a}_1 + (r^2 - r^1 + r^4) \mathbf{a}_2 + (r^3 - r^2 + r^4) \mathbf{a}_3.$$

Prin urmare, indicii Miller ai direcţiei $[r^1 r^2 r^3 r^4]$ sînt

$$[r^1 - r^3 + r^4, \quad r^2 - r^1 + r^4, \quad r^3 - r^2 + r^4]. \quad (13.32)$$

Desigur, dacă aceasta este posibil, ei trebuie simplificaţi.

Fie acum, dimpotrivă, ca o direcție oarecare să se definească în sistemul de coordonate romboedric, cu ajutorul indicilor Miller, $[l^1 l^2 l^3]$, adică vectorul ce îi corespunde este

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3.$$

Utilizând relațiile (13.4), vom descompune vectorii a_1, a_2, a_3 după baza sistemului hexagonal, a_1', a_2', a_3' . După reducerea termenilor asemenea ai sistemului, obținem

$$l = \frac{2l^1 - l^2 - l^3}{3} a_1' + \frac{l^1 + l^2 - 2l^3}{3} a_2' + \frac{l^1 + l^2 + l^3}{3} a_3'.$$

Iar acum, cu ajutorul relației (12.18) aflăm indicii Bravais

$$[l^1 - l^2, \quad l^2 - l^3, \quad l^3 - l^1, \quad l^1 + l^2 + l^3]. \quad (13.33)$$

Să trecem la simbolurile planurilor cristalografice (ale fețelor). Fie indicii Bravais ai unui plan cristalografic dat $(p_1 p_2 p_3 p_4)$. Conform relațiilor (12.22), aceasta înseamnă că vectorul normalei sale este

$$n = p_1 a^{1'} + p_2 a^{2'} + p_4 a^{3'}.$$

Componentele covariante ale acestui vector în sistemul de coordonate hexagonal vor fi

$$n_{1'} = p_1, \quad n_{2'} = p_2, \quad n_{3'} = p_4.$$

Componentele covariante ale aceluiași vector, n_1, n_2, n_3 , în sistemul de coordonate romboedric le vom găsi aplicînd formula (13.22), elementele matricei Q fiind transcrise în (13.30). Obținem

$$n_1 = \frac{1}{3} (2n_{1'} + n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3} (p_1 - p_3 + p_4),$$

$$n_2 = \frac{1}{3} (-n_{1'} + n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3} (p_2 - p_1 + p_4),$$

$$n_3 = \frac{1}{3} (-n_{1'} - 2n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3} (p_3 - p_2 + p_4).$$

Prin urmare, indicii Miller ai planului, $(p_1 p_2 p_3 p_4)$, sînt

$$(p_1 - p_3 + p_4 \quad p_2 - p_1 + p_4 \quad p_3 - p_2 + p_4). \quad (13.34)$$

Viceversa, dac  planul cristalografic este definit prin indicii Miller $(n_1 n_2 n_3)$,  n raport cu un sistem de coordonate romboedrice, atunci vectorul normalei sale este

$$\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}^1 + n_2 \mathbf{a}^2 + n_3 \mathbf{a}^3.$$

Componentele covariante ale vectorului \mathbf{n} ,  n sistemul de coordonate hexagonal, vor fi calculate cu rela ia (13.21); elementele matricei P s nt transcrise  n (13.29). Componentele $n_{\alpha'}$ s nt egale cu

$$\begin{aligned} n_{1'} &= n_1 - n_2, \\ n_{2'} &= n_2 - n_3, \\ n_{3'} &= n_1 + n_2 + n_3. \end{aligned}$$

Acum, folosind formula (12.22), afl m indicii Bravais ai acestui plan

$$(n_1 - n_2 \quad n_2 - n_3 \quad n_3 - n_1 \quad n_1 + n_2 + n_3). \quad (13.35)$$

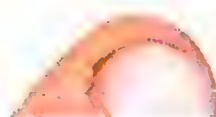
Rela iile (12.32)  i (13.33), care leag  indicii Bravais ai direc iilor cristalografice cu indicii Miller ai lor din sistemul de coordonate romboedrice, coincid cu formulele (13.34)  i (13.35), care leag  indicii Bravais de indicii Miller ai planurilor cristalografice. Acest fapt este folosit  n tabelul 13.1; indicii Bravais din sistemul de coordonate hexagonal (BH)  i indicii Miller din sistemul de coordonate romboedrice (MR), cuprin i  n el, se refer   n egal  m sur  at t la planuri (fe e) c t  i la direc ii (muchii).  n tabel s nt cuprin i, de asemenea,  i indicii Miller pentru planurile  i direc iile raportate la sistemul de coordonate hexagonal. Primii dintre (MHP) s nt coeficien ii n_{α} ai descompunerii vectorului normalei planului cristalografic,

$$\mathbf{n} = n_{\alpha} \mathbf{a}^{\alpha}$$

dup  vectorii fundamentali ai re elei reciproce, \mathbf{a}^{α} ; ceilal i (MHD) s nt coeficien ii l^{α} ai descompunerii vectorului unei direc ii cristalografice,

$$\mathbf{l} = l^{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}$$

dup  vectorii fundamentali ai re elei cristaline, \mathbf{a}_{α} . Cu alte cuvinte, MHP s nt componentele covariante ale vectorului \mathbf{n} , iar MHD s nt componentele contravariante ale vectorului \mathbf{l} .



Indicii Bravais într-o structură hexagonală (BH), indicii Miller într-o structură hexagonală pentru planuri (MHP) și pentru direcții (MHD) și indicii Miller într-o structură romboedrică (MR)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
0001	001	001	111	2112	212	302	512	3301	331	331	272
2110	210	100	110	1212	122	032	251	0331	031	361	227
1210	120	010	011	1122	112	332	125	3031	301	631	541
1120	110	110	101	2112	212	302	152	3301	331	331	451
2110	210	100	110	1212	122	032	215	0331	031	361	445
1210	120	010	011	1122	112	332	521	3032	302	632	811
1120	110	110	101	3120	310	510	541	3302	332	332	181
1010	100	210	211	2310	230	140	154	0332	032	362	118
1100	110	110	121	1230	120	450	415	3032	302	632	455
0110	010	120	112	3120	310	510	541	3302	332	332	545
1010	100	210	211	2310	230	140	154	0332	032	362	554
1100	110	110	121	1230	120	450	415	2023	203	423	711
0110	010	120	112	3210	320	410	451	2203	223	223	171
1011	101	211	100	1320	130	150	145	0223	023	243	117
1101	111	111	010	2130	210	540	514	2023	203	423	155
0111	011	121	001	3210	320	410	451	2203	223	223	515
1011	101	211	122	1320	130	150	145	0223	023	243	551
1101	111	111	212	2130	210	540	514	4041	401	841	311
0111	011	121	221	3121	311	511	210	4401	441	441	131
2021	201	421	111	2311	231	141	021	0441	041	481	113
2201	221	221	111	1231	121	451	102	4041	401	841	755
0221	021	241	111	3121	311	511	452	4401	441	441	575
2021	201	421	511	2311	231	141	245	0441	041	481	557
2201	221	221	151	1231	121	451	524	2114	214	304	714
0221	021	241	115	3211	321	411	542	1214	124	034	471
2111	211	301	421	1321	131	151	254	1124	114	334	147
1211	121	031	142	2131	211	541	425	2114	214	304	174
1121	111	331	214	3211	321	411	120	1214	124	034	417
2111	211	301	241	1321	131	151	012	1124	114	334	741
1211	121	031	124	2131	211	541	201	4221	421	601	751
1121	111	331	412	2113	213	101	201	2421	241	061	175
1012	102	212	011	1213	123	011	120	2241	221	661	517
1102	112	112	101	1123	113	111	012	4221	421	601	571
0112	012	122	110	2113	213	101	021	2421	241	061	157
1012	102	212	411	1213	123	011	102	2241	221	661	715
1102	112	112	141	1123	113	111	210	4223	423	201	311
0112	012	122	114	3031	301	631	722	2423	243	021	131

Tabelul 13.1 (continuare)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
2243	223	221	113	1340	130	570	527	3142	312	752	547
4223	423	201	131	4310	430	520	572	4312	432	522	130
2423	243	021	113	1430	140	270	257	1432	142	272	013
2243	223	221	311	3140	310	750	725	3142	312	752	301
1013	103	213	522	4310	430	520	572	2025	205	425	311
1103	113	113	252	1430	140	270	257	2205	225	225	131
0113	013	123	225	3140	310	750	725	0225	025	245	113
1013	103	213	144	5230	520	810	871	2025	205	425	177
1103	113	113	414	3520	350	170	187	2205	225	225	717
0113	013	123	441	2350	230	780	718	0225	025	245	771
1014	104	214	211	5230	520	810	871	3034	304	634	10.1.1
1104	114	114	121	3520	350	170	187	3304	334	334	1.10.1
0114	014	124	112	2350	230	780	718	0334	034	364	1.1.10
1014	104	214	255	5320	530	710	781	3031	304	634	277
1104	114	114	525	2530	250	180	178	3304	334	334	727
0114	014	124	552	3250	320	870	817	0334	034	364	772
1015	105	215	744	5320	530	710	781	4043	403	843	11.1.1
1105	115	115	474	2530	250	180	178	4403	443	443	1.11.1
0115	015	125	447	3250	320	870	817	0443	043	483	1.1.11
1015	105	215	122	4131	411	721	841	4043	403	843	577
1105	115	115	212	3411	341	251	184	4403	443	443	757
0115	015	125	221	1341	131	571	418	0443	043	483	775
3122	312	512	721	4131	411	721	221	4225	425	605	11.1.5
2312	232	142	172	3411	341	251	122	2425	245	065	5.11.1
1232	122	452	217	1341	131	571	212	2245	225	665	1.5.11
3122	312	512	121	4311	431	521	221	4225	425	605	1.11.5
2312	232	142	112	1431	141	271	122	2425	245	065	5.1.11
1232	122	452	211	3141	311	751	212	2245	225	665	11.5.1
3212	322	412	211	4311	431	521	481	5052	502	10.5.2	411
1322	132	152	121	1431	141	271	148	5502	552	552	141
2132	212	542	112	3141	311	751	814	0552	052	5.10.2	114
3212	322	412	271	4132	412	722	310	5052	502	10.5.2	877
1322	132	152	127	3412	342	252	031	5502	552	552	787
2132	212	542	712	1342	132	572	103	0552	052	5.10.2	778
4130	410	720	752	4132	412	722	574	6151	611	11.4.1	421
3410	340	250	275	3412	342	252	457	5611	561	471	142
1340	130	570	527	1342	132	572	745	1561	151	7.11.1	214
4130	410	720	752	4312	432	522	754	6151	611	11.4.1	10.8.5
3410	340	250	275	1432	142	272	475	5611	561	471	5.10.8
1561	151	7.11.1	8.5.10	4510	450	120	132	3252	322	872	213

Tabelul 13.1 (continuare)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
$\bar{6}5\bar{1}1$	$\bar{6}51$	$\bar{7}41$	$8.\bar{1}0.5$	$14\bar{5}0$	140	230	$21\bar{3}$	$\bar{5}322$	$\bar{5}32$	$\bar{7}12$	$5.10.1$
$\bar{1}6\bar{5}1$	$\bar{1}61$	$4.11.1$	$5.8.\bar{1}0$	$54\bar{1}0$	540	210	231	2532	252	$\bar{1}82$	$1.5.10$
$\bar{5}1\bar{6}1$	$\bar{5}11$	$11.7.1$	$10.5.8$	1540	150	130	$12\bar{3}$	$32\bar{5}2$	322	872	$10.1.5$
$\bar{6}511$	$\bar{6}51$	$\bar{7}41$	$24\bar{1}$	$41\bar{5}0$	410	320	312	4134	414	724	$11.1.2$
$\bar{1}6\bar{5}1$	$\bar{1}61$	$4.11.1$	$\bar{1}24$	5410	510	210	231	3414	344	254	$2.11.1$
$51\bar{6}1$	511	$11.7.1$	$41\bar{2}$	1540	150	130	123	1344	134	574	$1.2.11$
$21\bar{1}6$	216	306	312	$41\bar{5}0$	410	320	312	4134	414	724	132
$\bar{1}2\bar{1}6$	$\bar{1}26$	036	231	$52\bar{3}2$	522	812	$10.5.1$	3414	344	254	213
$\bar{1}126$	$\bar{1}16$	336	123	3522	352	172	$1.10.5$	1344	134	574	321
2116	216	306	132	2352	235	782	$5.1.10$	4314	434	524	312
$\bar{1}216$	$\bar{1}26$	036	213	5232	522	812	231	1434	144	274	231
$11\bar{2}6$	116	336	321	3522	352	172	123	3144	314	754	123
5140	510	310	321	2352	232	782	312	4314	434	524	$1.11.2$
4510	450	120	132	5322	532	712	321	1434	144	274	$2.1.11$
1450	140	230	213	2532	252	182	132	3144	314	754	$11.2.1$
5140	510	310	321								

Observație. În tabel sînt cuprinse simbolurile planurilor și direcțiilor care se proiectează pe emisfera superioară a sferei proiecțiilor; de aceea, în primele trei coloane, ultimul indice este nenegativ, pe cînd în ultima coloană este nenegativă suma indicilor. Dacă planul sau direcția sînt proiectate pe emisfera inferioară a sferei proiecțiilor, atunci trebuie examinat simbolul planului opus sau al direcției inverse — toți indicii lui sînt de semn contrar. Astfel, un simbol BH $31\bar{4}4$ nu există în tabel, însă găsind în tabel simbolul BH 3144 găsim că simbolului BH 3144 îi corespund simbolurile MHP 314 , MHD 754 și MR 123 .

§ 14. COMPLECȘII SIMETRIC ECHIVALENȚI AI PLANURILOR ȘI DIRECȚIILOR. FORMELE SIMPLE ALE CRISTALELOR

Transformările simetrice, proprii grupului punctual de simetrie al cristalului, repetă simetric în spațiu orice plan și orice direcție a unui cristal. Fie dat, de pildă, planul (100) al unui cristal din clasa $m3m$. Repetîndu-l prin toate transformările simetrice, obținem planurile $(\bar{1}00)$, (010) , $(0\bar{1}0)$, (001) , $(00\bar{1})$. Întregul set al acestor șase planuri simetric echivalente îl vom nota cu simbolul $\{100\}$: parantezele acolade arată că indicii pot fi supuși la toate permutările corespunzătoare transformărilor simetrice ale clasei de simetrie date. Dacă simbolul (100) desemnează rețeaua plană a structurii, atunci simbolul $\{100\}$ va desemna setul celor trei planuri de coordonate din rețeaua cristalului și totalitatea planurilor paralele cu ele. Dacă însă simbolul (100) desemnează o față a cristalului, atunci $\{100\}$ va desemna forma simplă a cristalului,

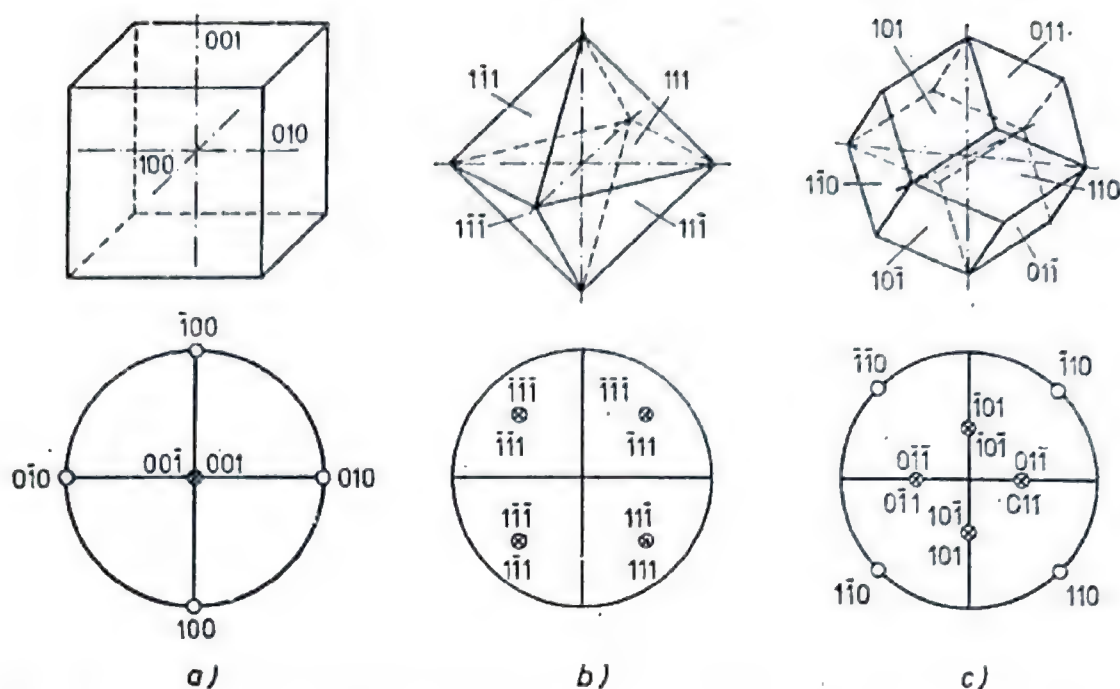


Fig. 14.1. Cele trei forme simple ale clasei $m\bar{3}m$: cubul (a), octaedrul (b) și dodecaedrul rhombic (c) și ansamblul elementelor lor de simetrie (pentru simplificarea desenului indicii fețelor sînt scriși fără paranteze).

adică totalitatea fețelor simetric echivalente ale poliedrului. În clasa $m\bar{3}m$ acest poliedru este un cub (fig. 14.1).

Se numește *formă simplă* poliedrul ale cărui fețe, toate, pot fi aduse în coincidență una cu alta, prin aplicarea transformărilor de simetrie proprii cristalului dat.

Aplicînd aceleași transformări simetrice ale clasei $m\bar{3}m$ direcției $[100]$ din rețea, obținem $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$ și $[00\bar{1}]$, adică orientările pozitive și negative ale axelor de coordonate. Vom nota totalitatea direcțiilor simetric echivalente cu simbolul $\langle 100 \rangle$. Dacă $[100]$ este o muchie a poliedrului, atunci $\langle 100 \rangle$ este totalitatea muchiilor simetric echivalente sau forma simplă a muchiilor. În clasa $m\bar{3}m$ acestea sînt muchiile cubului. Dacă $[100]$ este un șir al rețelei, atunci $\langle 100 \rangle$ va fi simbolul axelor de coordonate și al tuturor direcțiilor paralele cu ele (fig. 14.2).

În exemplul de mai sus, planul inițial, (100) , are o poziție particulară și anume, el se află la ieșirea axei 4, adică a elementului cu cea mai înaltă simetrie din clasa $m\bar{3}m$. Să luăm acum fața inițială în celelalte poziții particulare : la ieșirea axei 3 vom obține opt fețe simetric echivalente ale octaedrului $\{111\}$, iar la ieșirea axei 2, douăsprezece fețe ale dodecaedrului rhombic, $\{110\}$. Luînd fața inițială în cea mai generală poziție, astfel încît ea să nu coincidă cu nici un element de simetrie și să fie înclinată sub diferite unghiuri față de toate cele trei axe de coordonate, obținem forma simplă cea mai bogată a clasei $m\bar{3}m$ — poliedrul cu patru zeci și opt de fețe (fig. 14.3).

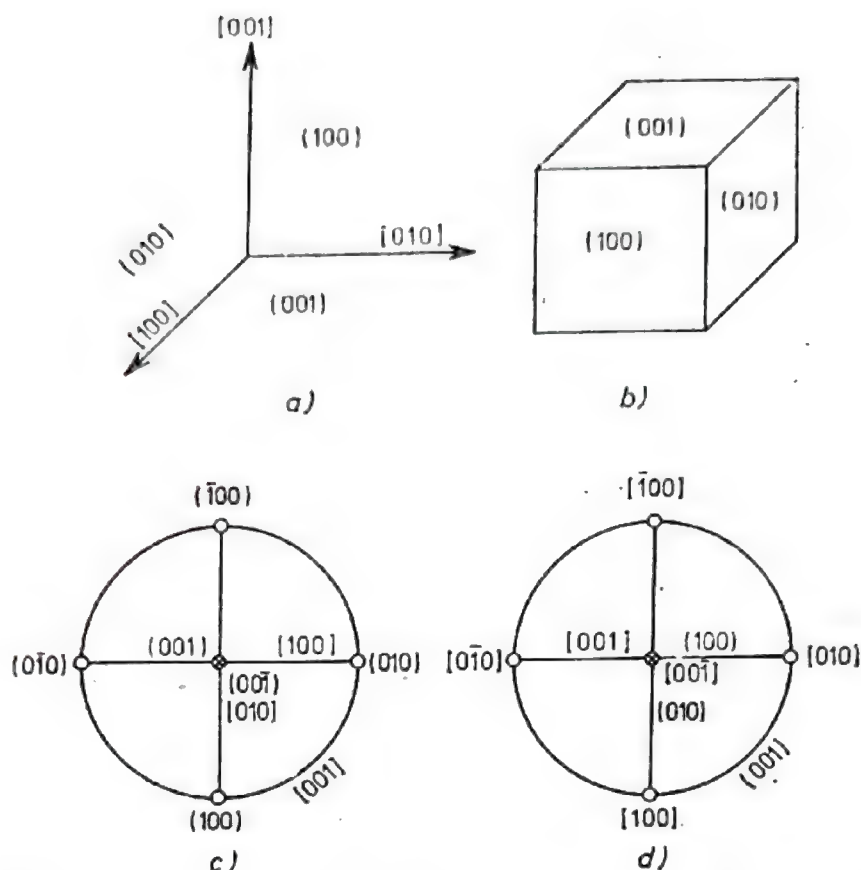


Fig. 14.2. Cele trei moduri de reprezentare a planurilor și direcțiilor simetric echivalente : complex de planuri și direcții care se intersectează într-un punct (a), fețe și muchii ale unei forme simple (b), proiecție stereografică (c) și proiecție gnomostereografică (d).

Fiecărei clase de simetrie îi corespunde o singură formă generală și câteva forme particulare simple, adică poliedre formate din fețe identice, care se transformă una în cealaltă prin operațiile de simetrie ale acestei clase. Clasa $m\bar{3}m$ este clasa cu cea mai înaltă simetrie. Ea abundă și în forme simple. Numărul de fețe ale formelor sale simple este respectiv de : 48 $\{hkl\}$; 24 $\{hhl\}$, $\{hk0\}$; 12 $\{110\}$; 8 $\{111\}$; 6 $\{100\}$. În clasa cel mai puțin simetrică a singoniei cubice, clasa 23, numărul de fețe ale formelor simple este respectiv de : 12 $\{hkl\}$, $\{hhl\}$, $\{hk0\}$, $\{110\}$; 6 $\{110\}$; 4 $\{111\}$.

Clasele cu simetrie mai joasă au și o varietate de forme simple mai restrânsă. Clasei m a sistemului monoclinic îi corespunde forma generală a diedrului $\{hkl\}$, adică două fețe paralele și o singură formă particulară, constând dintr-o singură față — monoe-drul $\{100\}$, sau $\{010\}$, iar în clasa 1 există numai o singură formă simplă — monoe-drul (fig. 14.4).

Formele simple pot fi închise, adică forme ce închid spațiul, cum sînt cubul, octaedrul, și deschise, ca prisme, piramide,

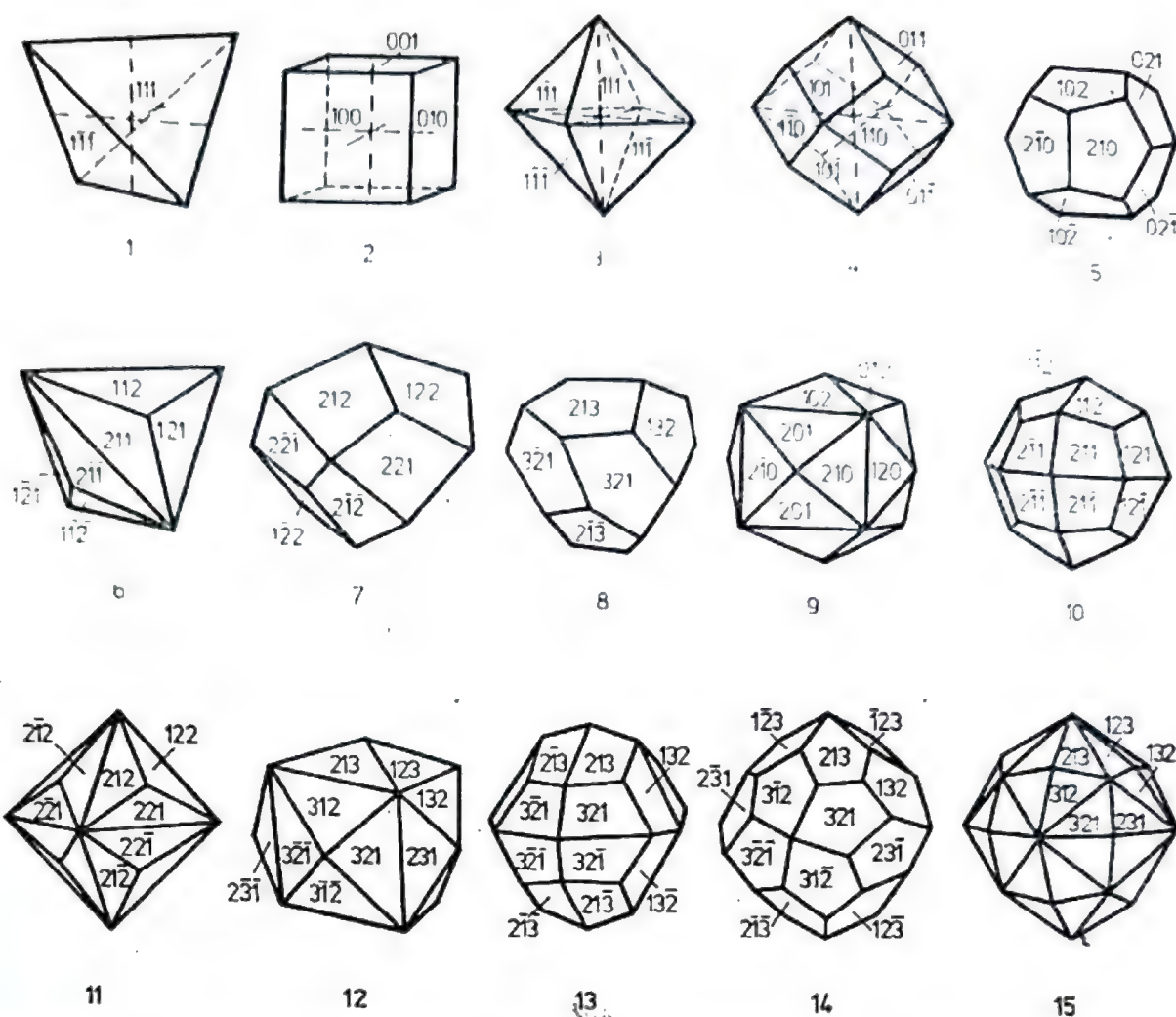


Fig. 14.3. Formele simple ale categoriei superioare: 1 — tetraedrul; 2 — cubul; 3 — octaedrul; 4 — dodecaedrul rombic; 5 — pentagondodecaedrul; 6 — trigontritetraedrul; 7 — tetragontritetraedrul; 8 — pentagontritetraedrul; 9 — cubul piramidal; 10 — tetragontrioctaedrul; 11 — trigontrioctaedrul; 12 — hexatetraedrul; 13 — didodecaedrul; 14 — pentagontrioctaedrul; 15 — poliedrul cu patru zeci și opt de fețe (pentru simplificarea desenului indicii fețelor sînt scriși fără paranteze).

pinacoizii. Formele reale de creștere a cristalelor sînt, de obicei, combinații ale cîtorva forme simple. Formele deschise pot fi întîlnite numai în combinații. În timp ce combinațiile pot fi dintre cele mai diferite, iar numărul lor, oricît de mare, există în total numai 47 de forme simple (Boldîrev, 1936). Toate aceste forme sînt cuprinse în tabelele 14.1 și 14.2 și în figurile 14.3 și 14.4.

Sensul unui simbol al unei forme simple depinde de clasa de simetrie cîreia îi aparține și de alegerea sistemului de coordonate cristalografice. De exemplu, în clasa $m\bar{3}m$, în simbolul $\{100\}$ permutările dau cele șase planuri ale cubului, pe cînd în clasa $2/m$, într-un același simbol, $\{100\}$, este posibilă numai o singură permutare: (100) și $(\bar{1}00)$, adică în total numai două planuri.

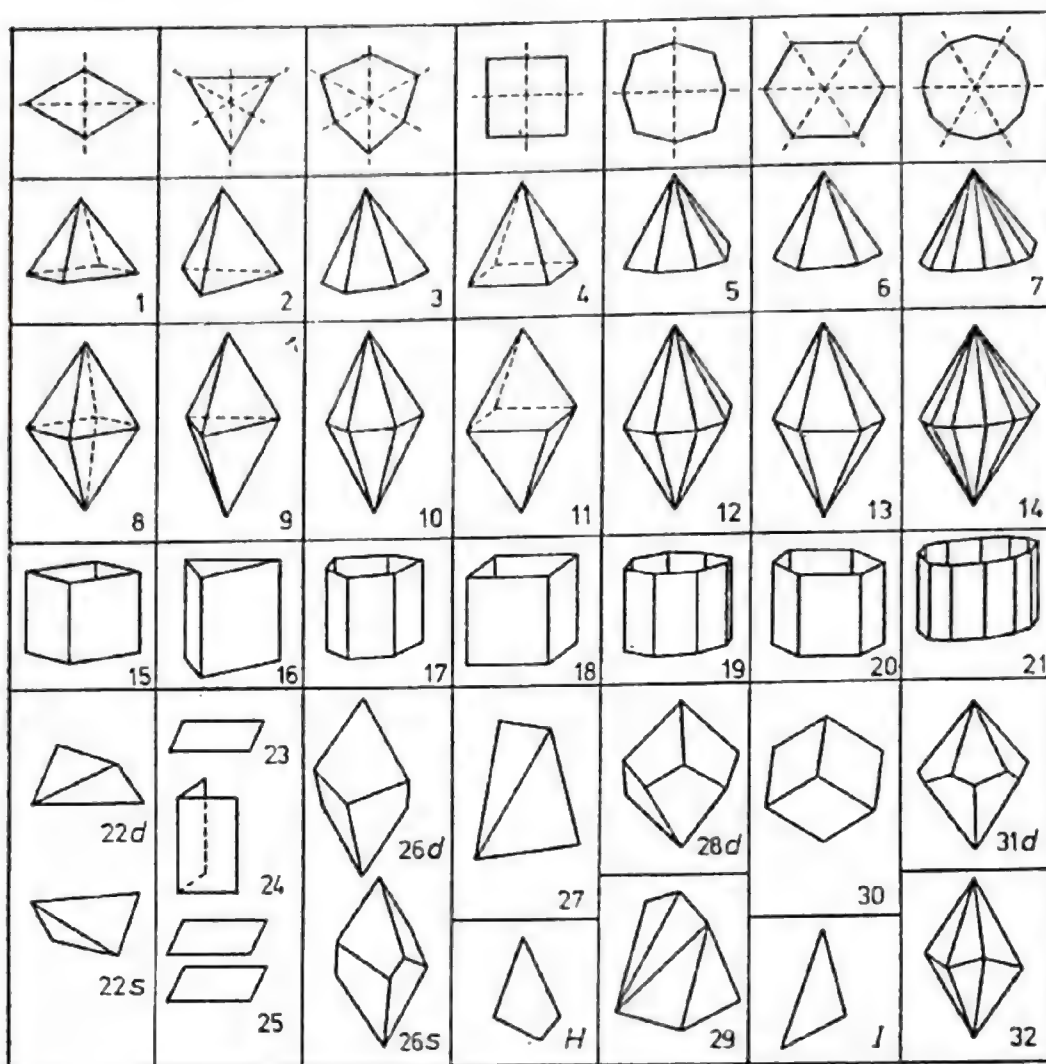


Fig. 14.4. Formele simple ale categoriilor inferioară și medie. Primul rând de sus — secțiunile formelor simple : romb, trigon, ditrigon, tetragon, ditetragon, hexagon, dihexagon ; 1 — 7 — piramide ; 8 — 14 — dipiramide ; 15 — 21 — prisme ; 1, 8, 15 — rombice, 2, 9, 16 — trigonale, 3, 10, 17 — ditrigonale, 4, 11, 18 — tetragonale, 5, 12, 19 — ditetragonale, 6, 13, 20 — hexagonale, 7, 14, 21 — dihexagonale, 22d și 22s — tetraedri rombici drept și respectiv, sting 23 — monoedru, 24 — diedru, 25 — pinacoid, 26d și 26s — trapezodri trigonali drept și, respectiv, sting, 27 — tetraedru tetragonal, 28d — trapezodru tetragonal drept, *H* — forma unei fețe de trapezodru, 29 — scalenodru tetragonal, 30 — romboedru, 31d — trapezodru hexagonal drept, 32 — scalenodru ditrigonal, *I* — forma unei fețe a scalenodrului.

Importanța unei forme simple este dată de numărul fețelor ei. Importanța formei simple generale a unui grup punctual dat este egală cu ordinul, sau multiplicitatea grupului punctual, adică cu numărul total de puncte echivalente, care se pot obține dintr-un singur punct prin intermediul tuturor transformărilor de simetrie ce intră în grupul punctual considerat. Dintre cele 32 de grupuri punctuale, cel mai înalt ordin îl are grupul $m\bar{3}m$: multiplicitatea lui este 48. Numărul punctelor echivalente din proiecția

Tabelul 14.1

Formele simple posibile și simbolurile lor în cristalele sistemului cubic
(cifrele cursive din tabel înseamnă numărul de ordine al formelor simple din figura 14.3)

Simbolul	Clasa				
	23	$m\bar{3}$	432	$43m$	$m\bar{3}m$
hkl	8	13	14	12	15
hhl ($h > l$)	7	11		7	11
hhl ($h > l$)	6	9		6	9
$hk0$	5		12		
111	1	3		1	3
110	4				
100	2				

Tabelul 14.2

Formele simple posibile și simbolurile lor în cristalele categoriilor medie și inferioară
(cifrele cursive din tabel înseamnă numărul de ordine al formelor simple din figura 14.4)

Sistemul triclinic : $\bar{1}$ clasa 1—23 ; clasa $\bar{1}$ —25

Sistemul monoclinic

Simbolul	Clasa		
	2	m	$2/m$
hkl	24		15
$h0l$	25	23	25
010	23	25	

Sistemul rombic

Simbolul	Clasa		
	222	$mm2$	mmm
hkl	22	1	8
$hk0$	15		
$0kl$	15	24	15
100, 010	25		
001	25	23	

Sistemul triclinic

Simbolul	Clasa				
	3	$\bar{3}$	32	$3m$	$\bar{3}m$
$hkil$	2	30	26	10	32
$h0hl$			30	2	30
$hb2hl$			9	6	13
$hki0$	16	20	17		21
1010			20	16	20
1120			16	20	
0001	23	25		23	25

Tabelul 14.2 (continuare)

Sistemul hexagonal

Simbolul	Clasa						
	6	$\bar{6}$	6/m	622	6mm	$\bar{6}m2$	6/mmm
<i>hkil</i>	6	9	13	31	7	10	13
<i>h0hl</i>				13		9	
<i>hh2hl</i>						13	
<i>hki0</i>	20	16	20	21		17	21
<i>1010</i>				20			
<i>1120</i>				20		16	20
0001	23	25		23		25	

Sistemul tetragonal

Simbolul	Clasa								
	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4}2m$	4/mmm		
hkl	4	27	12	28	5	29	12		
hhl				11	4	27	11		
hOl						11			
hk0				11			19		
110							18		
100									
001	23	25			23	25			

gnomostereografică, sau, altfel spus, numărul de fețe ale unei forme simple generale, definește ordinul grupului. Formele simple particulare corespund subgrupurilor grupului punctual dat. În fiecare dintre cele șapte sisteme cristalografice sau șase singonii există un grup de ordin superior, așa-numita *holoedrie* (clasa holoedrică de simetrie). Clasei holoedrice îi corespunde forma simplă generală cu numărul cel mai mare de fețe. Celelalte grupuri punctuale ale unui sistem sau singoniei cristalografice date sînt : așa-numitele *meriedrice* — subgrupurile grupului holoedric; *hemiedrice* — subgrupurile de indice 2; *tetartoedrice* — subgrupurile de indice 4; *octoedrice* — subgrupurile de indice 8. Ele pot fi ordonate într-un șir, în care fiecare grup următor este un subgrup al grupului precedent și se deduce din cel holoedric prin reducerea importanței, ceea ce înseamnă și micșorarea numărului de fețe

ale forme simple generale. Hemiedria corespunde micșorării numărului de fețe de două ori, tetartoedria — de patru ori, octoedria — de opt ori. De exemplu, într-o singonie cubică grupul $m\bar{3}m$ este holocedric, grupurile $m\bar{3}$, 432 , $\bar{4}3m$ sînt hemiedrice, grupul 23 este tetartoedric. Numărul de fețe din formele simple generale ale claselor meriedrice este respectiv de $1/2$, $1/4$, sau $1/8$ din numărul de fețe ale forme holocedrice generale.

În categoriile medie și inferioară reducerea numărului de fețe ale forme simple generale se poate produce ca și cum s-ar separa jumătatea superioară de jumătatea inferioară a poliedrului; de exemplu, dipiramida, pierzîndu-și planul de simetrie transversal se reduce la o piramidă, care, în acest caz, devine hemimorfă, axa principală devenind acum o axă polară.

Dacă sistemul hexagonal și sistemul trigonal sînt considerate drept o singură singonie hexagonală, atunci clasa 3 va fi o octoedrie a singoniei hexagonale: numărul de fețe ale forme simple generale a clasei 3 a piramidei trigonale s-a redus de 8 ori față de forma simplă generală a clasei holocedrice, $6/mmm$, a dipiramidei dihexagonale. Dacă însă cele două sisteme, hexagonal și trigonal sînt considerate separat, atunci clasa 3 va fi tetartoedria clasei $\bar{3}m$, iar clasa 6, tetartoedria clasei $6/mmm$.

Relațiile de reciprocitate dintre grupurile punctuale și subgrupuri sînt reprezentate schematic în figura 14.5. Grupurile unui același sistem sînt unite cu linii întrerupte groase. Astfel, grupul superior al sistemului rombic mmm include două subgrupuri: 222 și $mm2$. Deoarece în grupul mmm cele trei axe de ordinul doi cît și fiecare dintre ele pot deveni o axă singulară de ordinul doi în grupul $mm2$, rezultă că grupul mmm include trei subgrupuri: $mm2_x$, $mm2_y$, $mm2_z$; în figura 14.5 acest fapt este indicat printr-o linie întreruptă triplă.

Subgrup al grupului mmm este și grupul $2/m$, care nu mai aparține sistemului rombic, ci este grupul superior al sistemului monoclinic; legătura dintre ele este marcată printr-o linie subțire. Sînt, de fapt, trei linii fine, corespunzătoare celor trei direcții posibile ale axei 2: 2_x , 2_y , 2_z .

Grupul $2/m$ include, la rîndul său, două grupuri ale sistemului monoclinic, 2 și m , care pot fi ordonate în șiruri astfel: $2/m \supset 2 \supset 1$, $2/m \supset m \supset 1$. Pe lîngă aceasta, șirul $2/m \supset \bar{1} \supset 1$ arată că tot subgrupuri ale grupului $2/m$ sînt și grupurile sistemului triclinic.

O atenție deosebită trebuie acordată legăturii dintre grupurile sistemelor cubic și trigonal: $m\bar{3}m \supset \bar{3}m$, $432 \supset 32$, $\bar{4}3m \supset 3m$, $m\bar{3} \supset 3$ și $23 \supset 3$. Ele nu apar prea clar în modelul standard de aranjare a cristalelor, dar devin perfect evidente, dacă pe axa Z

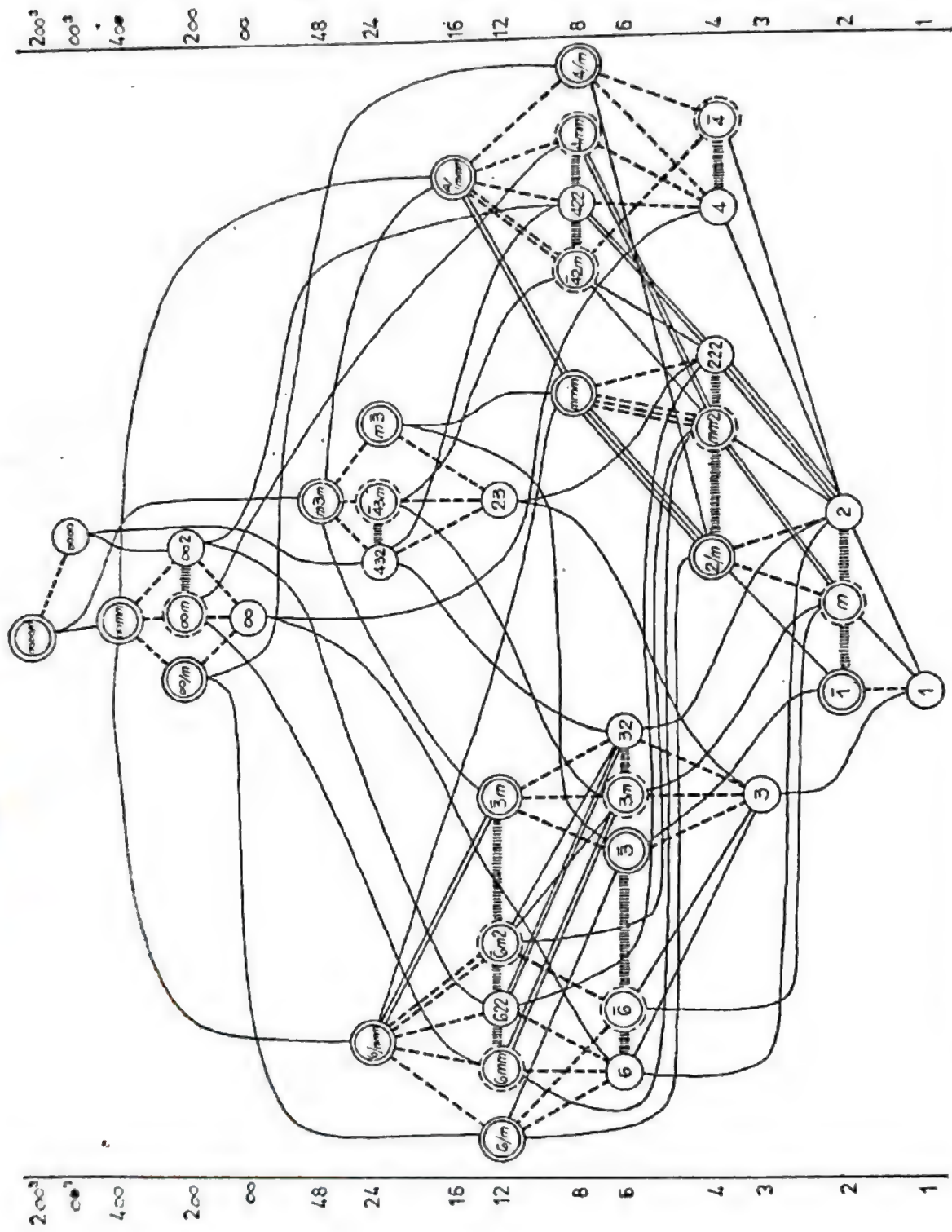


Fig. 14.5. Corelațiile dintre grupurile și subgrupurile punctuale de simetrie.

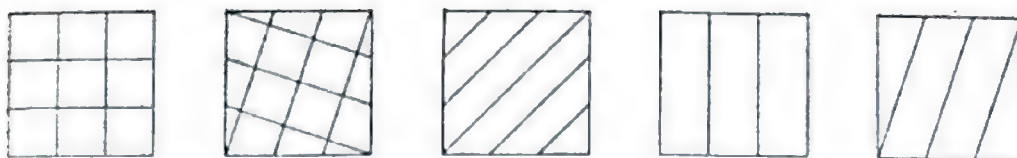


Fig. 14.6. Simetria fețelor celor cinci cuburi cristalografice diferite (după A. V. Șubnikov).

se trasează direcția $[111]$ a cristalului cubic, iar pe axa X , direcția $[\bar{1}\bar{1}0]$. Liniile punctate orizontale leagă grupurile izomorfe.

În stînga și în dreapta figurii 14.5 sînt notate multiplicitățile fiecărui subgrup. Cu ajutorul acestui desen se poate afla deodată numărul de fețe atît al forme generale simple, cît și al celei particulare fiecărei clase de simetrie.

Fiecărei clase de simetrie îi corespunde o singură formă generală, însă cîteva forme particulare. La rîndul ei, o formă particulară poate fi întîlnită în cîteva clase de simetrie. Așa, de exemplu, în toate clasele sistemului cubic se poate genera un cub. Dacă se consideră poliedrele nu numai ca figuri geometrice, ci ca figuri materiale, cu proprietăți fizice bine determinate, avînd, în particular, o simetrie diferită a fețelor, atunci ne putem da seama că figuri geometrice identice pot fi diferite din punct de vedere cristalografic, dacă ele se deosebesc prin elementele de simetrie sau prin poziția acestor elemente în raport cu fața.

În fiecare dintre cele cinci clase ale sistemului cubic, cubul se obține ca formă particulară, dacă se ia fața inițială în centrul proiecției. În acest caz se obține însă o aranjare diferită, în raport cu fețele cubului, a elementelor de simetrie existente, și deci va fi diferită și simetria feței însăși. A. V. Șubnikov a propus să se reprezinte, pentru a fi mai intuitiv, cinci cuburi cristalografice diferite, hașurînd diferit fețele lor (fig. 14.6) (v. Șubnikov, Flint, Boki — 1940). Din aceste hașuri se vede că cele cinci figuri geometrice complet identice pot avea atît o simetrie complet diferită a fețelor cît și o simetrie diferită a proprietăților fizice. Mai mult încă, în clasele 23 și 432 cuburile pot fi și enantiomorfe (fig. 14.7).

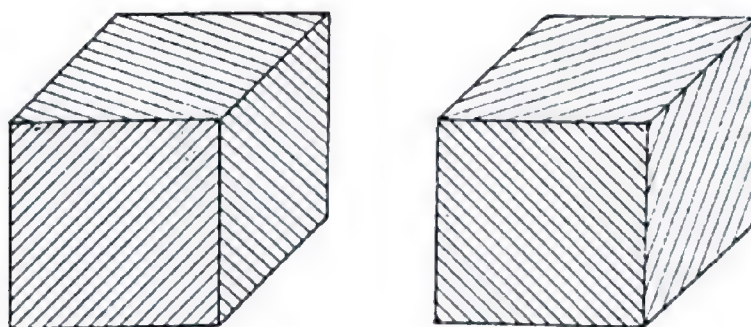


Fig. 14.7. Cuburile drept și stîng, din clasa 23.

Deosebirile cristalografice dintre formele geometrice identice sînt pe deplin reale. Ele se pot face vizibile după denivelările neregulate de creștere, după hașurile fețelor naturale ale cristalului sau după figurile care apar prin corodare, adică după micile scobituri, care fac să apară mici fețe cristalografice pe fețele cristalului, prin acțiunea unui solvent activ. Figurile ce apar prin corodare se formează în locurile în care pe suprafața cristalului apare un defect oarecare de construcție cristalografică, în special dislocații. În funcție de forma figurii de coroziune se poate stabili simetria reală a feței.

G. B. Boki a demonstrat că numărul tuturor formelor cristalografice simple diferite ale cristalelor este egal cu 146, iar dacă se mai ține cont încă și de diferența dintre formele drepte și cele stîngi, atunci acest număr devine 193 (Boki, 1940). I. I. Șafranovski a dedus 1403 varietăți structurale ale aceluiași forme simple, care se deosebesc prin simetria infinită, adică după elementele de simetrie ale grupurilor spațiale (Șafranovski, 1968).

Pe lângă forma simplă (sau poliedrică) a feței, un cristal mai poate fi caracterizat prin formele vîrfurilor și ale muchiilor. Forma simplă de vîrfuri o constituie totalitatea vîrfurilor unui cristal, care se obțin unul din altul cu ajutorul tuturor operațiilor de simetrie, iar forma simplă de muchie este o aceeași totalitate a muchiilor.

Fasciculul simplu tridimensional de muchii este totalitatea muchiilor legate prin elemente de simetrie ale unei anumite clase, care sînt translate paralel cu ele însele, într-un punct origine. Astfel, în clasa $m\bar{3}m$ simbolul $\langle 100 \rangle$ înseamnă atît totalitatea muchiilor unui cub, cît și complexul axelor 4; fasciculul direcțiilor axelor 3 are simbolul $\langle 111 \rangle$. Proiecția stereografică a formei simple de muchii coincide cu proiecția gnomostereografică a formei simple de fețe.

Într-un mediu izotrop, optic inactiv, orice direcție nepolară, neaxială, nu este singulară; ea prezintă cea mai înaltă simetrie, fiind descrisă de grupul de simetrie ∞/m , adică de simetria unui cilindru infinit, imobil. Într-un cristal, simetria oricărei direcții poate fi determinată studiind, conform principiului Curie, superpoziția elementelor de simetrie ale cristalului și ale unui cilindru orientat după aceea direcție, a cărei simetrie se caută (Jeludev, 1971). Simetria căutată a direcției este definită ca fiind grupul comun de ordinul cel mai înalt al ambelor grupuri, care corespunde orientării date a cristalului și cilindrului.

Direcțiile polare sînt subordonate grupului ∞m , adică simetriei conului de rotație mobil. Grupului ∞m îi sînt subordonate 10 clase polare: 1, 2, 3, 4, 6 m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$. În aceste clase există direcții polare singulare. Direcțiile polare singulare

pot exista în toate clasele fără centru, printre care clasele polar-neutre, 222 , 23 , $\bar{6}$, $\bar{6}m2$, 622 , $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 422 , $\bar{4}3m$, 432 .

Direcțiile axiale sînt descrise de grupurile subordonate grupului de simetrie ∞/m : 1 , 2 , 3 , 4 , 6 , m , $2/m$, $\bar{6}$, $4/m$, $6m$, $\bar{1}$, $\bar{4}$, $\bar{3}$. Astfel de direcții sînt posibile în toate cristalele.

Direcțiile nepolare există în 30 de clase; ele nu există numai în clasele 1 și 3. În clasa 1 toate direcțiile singulare sînt polare. În clasa 3, axa 3 este singulară, polară, toate celelalte direcții fiind simple, polare.

§ 15. UNELE PROBLEME ALE CRISTALOGRAFIEI GEOMETRICE

Legătura dintre indicii Miller ai fețelor și ai muchiilor și vectorii normali la fețe sau după direcțiile muchiilor permite reducerea multor probleme cristalografice la probleme pur geometrice. Să examinăm unele dintre aceste probleme.

Problema 1. Poate o direcție $[l^1 l^2 l^3]$ să fie o muchie a feței $(n_1 n_2 n_3)$? Pentru ca direcția dată, l , să poată fi o muchie a feței ea trebuie să fie paralelă cu această față și, prin urmare, perpendiculară la normala n a feței. Condiția de ortogonalitate a doi vectori este ca produsul lor scalar să fie nul

$$l \cdot n = 0. \quad (15.1)$$

Deoarece

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3, \quad (15.2)$$

$$n = n_1 a^1 + n_2 a^2 + n_3 a^3,$$

această condiție se transcrie în forma

$$(l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3) \cdot (n_1 a^1 + n_2 a^2 + n_3 a^3) = 0. \quad (15.3)$$

Vom face înmulțirea scalară, termen cu termen, ținînd cont că

$$a_\alpha \cdot a^\beta = \delta_\alpha^\beta. \quad (15.4)$$

Numai trei dintre cei nouă termeni nu sînt identic nuli, așa că obținem, în final

$$l^1 n_1 + l^2 n_2 + l^3 n_3 = 0. \quad (15.5)$$

Direcția $[l^1 l^2 l^3]$ poate fi o muchie a feței $(n_1 n_2 n_3)$ în cazul, și numai în cazul, în care este satisfăcută condiția (15.5). Această relație poate fi dedusă mult mai rapid folosind consecvent seriarea prescurtată. În locul dezvoltării (15.2) scriem

$$l = l^\alpha a_\alpha, n = n_\beta a^\beta, \quad (15.6)$$

iar în locul condiției (15.3)

$$l^\alpha a_\alpha \cdot n_\beta a^\beta = 0. \quad (15.7)$$

Utilizăm acum formula (15.4). Atunci, în loc de (15.7), se poate scrie

$$l^\alpha n_\beta \delta_\alpha^\beta = 0. \quad (15.8)$$

Să calculăm expresia $n_\beta \delta_\alpha^\beta$. Conform definiției

$$n_\beta \delta_\alpha^\beta = n_1 \delta_\alpha^1 + n_2 \delta_\alpha^2 + n_3 \delta_\alpha^3. \quad (15.9)$$

În această sumă numai un termen este diferit de zero ; care anume este el depinde de valoarea indicelui α . Dacă, de exemplu,

$$\alpha = 1,$$

atunci

$$\delta_\alpha^1 = \delta_1^1 = 1,$$

iar

$$\delta_\alpha^2 = \delta_1^2 = 0,$$

și

$$\delta_\alpha^3 = \delta_1^3 = 0.$$

Astfel, în acest caz, este diferit de zero (și egal cu n_1) numai primul termen al sumei (15.9)

$$n_\beta \delta_1^\beta = n_1.$$

Dacă

$$\alpha = 2,$$

atunci singurul termen diferit de zero în această sumă va fi cel de al doilea, deoarece

$$\delta_2^1 = \delta_2^2 = 0,$$

iar

$$\delta_2^2 = 1,$$

prin urmare,

$$n_\beta \delta_2^\beta = n_2.$$

Analog ne convingem că

$$n_\beta \delta_3^\beta = n_3.$$

Evident, aceste trei egalități pot fi înlocuite cu o singură egalitate,

$$n_\beta \delta_\alpha^\beta = n_\alpha, \quad (15.10)$$

în care indicele α poate căpăta oricare dintre cele trei valori posibile. Exact la fel s-ar fi putut arăta că

$$l^\alpha \delta_\alpha^\beta = l^\beta. \quad (15.11)$$

Relațiile obținute, (15.10) și (15.11), permit enunțarea următoarei reguli generale: cînd o anumită mărime se însumează după simbolurile Kronecker, rezultatul nu se modifică dacă simbolul lui Kronecker nu se scrie deloc, iar la mărimea însumată cu el se înlocuiește indicele de însumare cu indicele liber al simbolului Kronecker.

Utilizînd oricare dintre formulele (15.10) sau (15.11) pentru simplificarea egalității (15.8), obținem soluția problemei. Substituind în (15.8) expresia (15.10), obținem

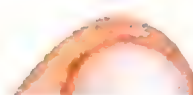
$$l^\alpha n_\alpha = 0. \quad (15.12)$$

Aceasta este scrierea concisă a soluției (15.5), obținută mai înainte. În (15.8) se poate substitui expresia (15.11). Atunci obținem

$$l^\beta n_\beta = 0,$$

ceea ce este aceeași sumă; modificarea indicilor de însumare, așa cum s-a remarcat deja, nu are nici o importanță.

Grafic, această problemă se rezolvă ușor cu ajutorul proiecției stereografice: direcția $[l^1 l^2 l^3]$ poate fi o muchie a feței $(n_1 n_2 n_3)$ dacă punctul care reprezintă direcția se află pe cercul mare, care reprezintă planul. Soluția poate fi obținută și cu ajutorul proiecției gnomostereografice: cercul mare, care reprezintă direcția $[l^1 l^2 l^3]$, trebuie să treacă prin punctul care reprezintă planul $(n_1 n_2 n_3)$.



Problema 2. Să se găsească muchia după care se intersectează fețele $(n_1 n_2 n_3)$ și $(m_1 m_2 m_3)$. Muchia căutată se află pe ambele fețe. De aceea, vectorul l , care o definește, este perpendicular pe normalele n și m ale ambelor fețe. Ne amintim că aceasta este tocmai o proprietate a produsului vectorial al celor doi vectori: acesta este un vector perpendicular pe fiecare dintre factori. Vom folosi produsul vectorial înmulțit cu volumul celulei cristalografice, v (desigur, înmulțirea unui vector cu o cantitate pozitivă nu schimbă direcția vectorului)

$$l = v n \times m. \quad (15.13)$$

Ordinea factorilor nu contează în acest caz, dat fiind că direcția muchiei se determină totuși, cu o precizie de pînă la semn. Să calculăm acest produs vectorial, avînd în vedere că

$$n = n_1 a^1 + n_2 a^2 + n_3 a^3, \quad m = m_1 a^1 + m_2 a^2 + m_3 a^3.$$

Înlocuim această expresie în (15.13)

$$l = v(n_1 a^1 + n_2 a^2 + n_3 a^3) \times (m_1 a^1 + m_2 a^2 + m_3 a^3).$$

Vom înmulți vectorial, termen cu termen, ținînd cont că produsul vectorial al fiecărui vector cu el însuși este nul și că prin schimbarea ordinii factorilor produsului vectorial, acesta își schimbă semnul. Atunci obținem

$$l = v([n_2 m_3 - n_3 m_2] a^2 \times a^3 + [n_3 m_1 - n_1 m_3] a^3 \times a^1 + [n_1 m_2 - n_2 m_1] a^1 \times a^2).$$

Însă produsele vectoriale ale vectorilor bazei rețelei reciproce, înmulțite cu volumul celulei cristalografice, sînt egale, așa cum s-a calculat în § 11, cu vectorii bazei rețelei directe (tocmai pentru aceasta se și introduce factorul v). Ținînd cont de formula (11.6), găsim relația

$$l = (n_2 m_3 - n_3 m_2) a_1 + (n_3 m_1 - n_1 m_3) a_2 + (n_1 m_2 - n_2 m_1) a_3. \quad (15.14)$$

Deoarece numerele n_α și m_α sînt numere întregi, coeficienții vectorilor bazei vor fi, de asemenea, numere întregi; evident, ei sînt tocmai indicii Miller căutați ai muchiei $[h^2 l^3]$

$$l^1 = n_2 m_3 - n_3 m_2, \quad l^2 = n_3 m_1 - n_1 m_3, \quad l^3 = n_1 m_2 - n_2 m_1. \quad (15.15)$$

Prin utilizarea simbolurilor Levi-Civita (v. § 13), vom scrie formula (15.13) sub forma

$$l = v n_\alpha a^\alpha \times m_\beta a^\beta, \quad (15.16)$$

iar cu ajutorul identității (13.10), obținem

$$l = \delta^{\alpha\beta\gamma} n_\alpha m_\beta a_\gamma$$

de unde

$$l^\gamma = \delta^{\gamma\alpha\beta} n_\alpha m_\beta. \quad (15.17)$$

Această formulă este foarte ușor de folosit, dacă remarcăm că fixînd unul dintre indici, lăsăm pentru valorile celorlalți doi indici doar numai două posibilități. Astfel, dacă $\gamma = 1$, atunci sînt diferiți de zero numai $\delta^{123} = 1$ și $\delta^{132} = -1$. Deci,

$$l^1 = \delta^{1\alpha\beta} n_\alpha m_\beta = \delta^{123} n_2 m_3 + \delta^{132} n_3 m_2 = n_2 m_3 - n_3 m_2,$$

ceea ce coincide cu prima dintre formulele (15.15).

Pentru rezolvarea problemei 2 se utilizează adesea următoarea regulă mnemotehnică simplă : scriem indicii fețelor ($n_1 n_2 n_3$) și ($m_1 m_2 m_3$) pe două linii și efectuăm înmulțirea încrucișat.

$$\begin{array}{ccccccc} n_1 & n_2 & n_3 & n_1 & n_2 & n_3 & \\ & \times & & \times & & \times & \\ m_1 & m_2 & m_3 & m_1 & m_2 & m_3 & \end{array}$$

În proiecția gnomostereografică problema 2 se poate rezolva ușor cu ajutorul rețelei Wulf : rotind rețeaua în jurul centrului proiecției se găsește arcul de cerc mare, care poate fi făcut să treacă prin cele două puncte care corespund proiecțiilor fețelor date.

Problema 3. Să se găsească fața căreia îi aparțin muchiile $[l^1 l^2 l^3]$ și $[k^1 k^2 k^3]$. Raționînd ca și în cazul problemei 2, deducem că normala n la fața necunoscută este perpendiculară pe ambele muchii. Vom căuta direcția ei tot sub formă de produs vectorial, de data aceasta însă nu înmulțit, ci împărțit la volumul celulei elementare

$$n = \frac{1}{v} l \times k. \quad (15.18)$$

Înlocuim aici expresiile dezvoltate ale vectorilor l și k

$$l = l^1 a_1 + l^2 a_2 + l^3 a_3 = l^\alpha a_\alpha, \quad (15.19)$$

$$k = k^1 a_1 + k^2 a_2 + k^3 a_3 = k^\alpha a_\alpha$$

și, exact ca și în problema precedentă, facem înmulțirea vectorială, termen cu termen. Produsele vectoriale ale vectorilor bazei împărțite prin volumul celulei cristalografice sînt egale cu vectorii bazei rețelei reciproce. Obținem deci

$$n = (l^2 k^3 - l^3 k^2) a^1 + (l^3 k^1 - l^1 k^3) a^2 + (l^1 k^2 - l^2 k^1) a^3, \quad (15.20)$$

astfel încît indicii $(n_1 n_2 n_3)$ sînt dați de formulele

$$n_1 = l^2 k^3 - l^3 k^2, \quad n_2 = l^3 k^1 - l^1 k^3, \quad n_3 = l^1 k^2 - l^2 k^1, \quad (15.21)$$

care amintesc foarte mult de relațiile (15.15). Utilizînd simbolul Levi-Civita, obținem, analog cu formula (15.17),

$$n_\alpha = \delta_{\alpha\beta\gamma} l^\beta k^\gamma. \quad (15.22)$$

Și această problemă poate fi rezolvată efectuînd o înmulțire încrucișată, ca în problema 2.

În proiecție gnomostereografică problema 3 se rezolvă tot cu ajutorul rețelei Wulf: intersecția celor două arce ale cercurilor mari, care prezintă proiecțiile muchiilor, dă punctul proiecției acelei fețe pe care se află ambele muchii.

În proiecție stereografică ultimele două probleme se rezolvă tot cu ajutorul rețelei Wulf, cu singura deosebire că proiecțiile planurilor sînt arcuri, pe cînd proiecțiile direcțiilor sînt puncte (v. § 2).

Problema 4. Cristalele hexagonale (formule de calcul în indicii Bravais). Dacă sînt dați nu indicii Miller, ci indicii Bravais, atunci, în general vorbind, trebuie să se treacă la notațiile vectoriale ale planurilor și direcțiilor cristalografice (metodele de trecere au fost tratate în § 12), apoi să se rezolve problema pusă și numai după aceea să se revină la indicii Bravais. Totuși, pentru problemele care se întîlnesc cel mai des, nu este greu să se deducă formulele de calcul, direct în indicii Bravais. Să transcriem trei dintre aceste formule.

Condiția ca o direcție (muchie) cu indicii Bravais $[r^1 r^2 r^3 r^4]$ să se afle în planul (fața) avînd indicii Bravais $(p^1 p^2 p^3 p^4)$ este de forma

$$r^1 p_1 + r^2 p_2 + r^3 p_3 + r^4 p_4 = 0. \quad (15.23)$$

Dacă indicii Bravais ai două fețe ale unui cristal sînt $(p_1 p_2 p_3 p_4)$ și $(q_1 q_2 q_3 q_4)$, atunci indicii Bravais ai muchiei $[r^1 r^2 r^3 r^4]$, care este intersecția lor, sînt definiți prin raportul

$$\begin{aligned} r^1 : r^2 : r^3 : r^4 &= [(p_2 - p_3) q_4 - (q_2 - q_3) p_4] : \\ &: [(p_3 - p_1) q_4 - (q_3 - q_1) p_4] : [(p_1 - p_2) q_4 - (q_1 - q_2) p_4] : \\ &: 3(p_1 q_2 - p_2 q_1). \end{aligned} \quad (15.24)$$

Dacă indicii Bravais ai două muchii ale cristalului sînt $[r^1 r^2 r^3 r^4]$ și $[s^1 s^2 s^3 s^4]$, atunci indicii feței, definită de aceste muchii se vor afla între ei ca

$$\begin{aligned} p_1 : p_2 : p_3 : p_4 &= [(r^2 - r^3) s^4 - (s^2 - s^3) r^4] : [(r^3 - r^1) s^4 - (s^3 - s^1) r^4] : \\ &: [(r^1 - r^2) s^4 - (s^1 - s^2) r^4] : [(r^2 - r^3)(s^3 - s^1) - (s^2 - s^3)(r^3 - r^1)]. \end{aligned} \quad (15.25)$$

Problema 5. Calculul lungimii vectorului rețelelor directă și reciprocă. Utilizînd tensorul metric al rețelei, se pot rezolva și probleme mai complicate ale cristalografiei geometrice, în particular, cele legate de calculul produselor scalare. Astfel, produsul scalar a doi vectori

$$\mathbf{k} = k^\alpha \mathbf{a}_\alpha$$

și

$$\mathbf{l} = l^\beta \mathbf{a}_\beta,$$

definiți prin componentele lor contravariante, k^α și l^β , este egal cu

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{l} = k^\alpha l^\beta \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta.$$

Însă, conform formulei (11.1),

$$\mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta = g_{\alpha\beta},$$

prin urmare,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{l} = g_{\alpha\beta} k^\alpha l^\beta. \quad (15.26)$$

De aici rezultă procedeul de calcul al lungimii unui vector dat prin componentele lui contravariante

$$l = \sqrt{\mathbf{l} \cdot \mathbf{l}} = \sqrt{g_{\alpha\beta} l^\alpha l^\beta}. \quad (15.27)$$

Dacă vectorii sînt dați prin componentele lor covariante, atunci în formulele analoage vor apărea acum componentele contravariante ale tensorului metric, nu cele covariante: produsul scalar al vectorilor

$$\mathbf{m} = m_{\alpha} \mathbf{a}^{\alpha} \text{ și } \mathbf{n} = n_{\beta} \mathbf{a}^{\beta}$$

este egal cu

$$\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = m_{\alpha} n_{\beta} \mathbf{a}^{\alpha} \cdot \mathbf{a}^{\beta},$$

sau

$$\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} = g^{\alpha\beta} m_{\alpha} n_{\beta}, \quad (15.28)$$

iar lungimea vectorului \mathbf{n} , definit prin componentele sale covariante n_{α} , va fi

$$n = \sqrt{g^{\alpha\beta} n_{\alpha} n_{\beta}}. \quad (15.29)$$

Dacă însă sînt cunoscute componentele covariante și cele contravariante ale vectorilor, atunci produsele scalare și lungimile se calculează și fără utilizarea tensorului metric. De exemplu,

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{n} = l^{\alpha} n_{\alpha}.$$

Problema 6. Distanțele dintre planuri. Lungimea n a vectorului rețelei reciproce, $\mathbf{n} = n_{\alpha} \mathbf{a}^{\alpha}$ este inversa distanței dintre planurile sistemului de planuri paralele $(n_1 n_2 n_3)$, legate între ele printr-o translație cu vectorul \mathbf{n} . Prin urmare, distanța dintre planuri, $d(\mathbf{n})$, este dată de formula

$$1/d^2(\mathbf{n}) = g^{\alpha\beta} n_{\alpha} n_{\beta} \quad (15.30)$$

rezultată din (15.29). În cazul determinării distanțelor dintre planuri în rețelele neprimitive (centrate) se poate utiliza nu numai tensorul metric al rețelei centrate, ci și tensorul metric al rețelei primitive corespunzătoare. În ultimul caz trebuie avut în vedere că planurile care trec prin nodurile de centrare sînt date de indici Miller care pot fi simplificați. Astfel, în rețeaua cubică cu fețe centrate, prin nodurile de centrare trec planurile (200) și (220); distanțele corespunzătoare dintre planuri,

$$d_{(200)} = a/2, \quad d_{(220)} = a\sqrt{2}/4$$

sint, așa cum era de așteptat, de două ori mai mici decit distanțele analoage dintre planurile rețelei cubice simple, avind același parametru, a ,

$$d_{(100)} = a, d_{(110)} = a\sqrt{2}/2.$$

Problema 7. Calculul unghiurilor dintre direcțiile și planurile cristalografice. Dacă sint cunoscute proiecțiile acestor direcții sau planuri, atunci problema se rezolvă ușor cu ajutorul rețelei Wulf. Distanțele unghiulare dintre două puncte de pe o sferă se măsoară pe arcele cercurilor mari. Dacă ambele puncte (ale proiecției direcțiilor, în proiecție stereografică, sau ale proiecțiilor planurilor, în proiecție gnomostereografică) se află pe aceeași emisferă, atunci rotind rețeaua (sau hîrtia de calc pe care este desenată proiecția) aducem ambele puncte pe același meridian și măsurăm unghiul pe ele. Dacă punctele se află pe emisfere diferite, atunci le aducem pe meridiane simetrice față de centrul rețelei și măsurăm pe unul dintre meridiane, de la punct spre pol, iar pe celălalt meridian, de la pol spre punct.

Să rezolvăm aceeași problemă analitic. Direcțiilor cristalografice $[k^1k^2k^3]$ și $[l^1l^2l^3]$ le corespund vectorii

$$\mathbf{k} = k^\alpha \mathbf{a}_\alpha$$

și

$$\mathbf{l} = l^\beta \mathbf{a}_\beta;$$

cosinusul unghiului dintre ele,

$$\cos \varphi = \mathbf{k} \cdot \mathbf{l} / (kl)$$

este dat de formula

$$\cos \varphi = \frac{g_{\alpha\beta} k^\alpha l^\beta}{\sqrt{(g_{\gamma\eta} k^\gamma k^\eta) (g_{\xi\zeta} l^\xi l^\zeta)}}. \quad (15.31)$$

Unghiul ψ dintre normalele la planurile cristalografice $(m_1m_2m_3)$ și $(n_1n_2n_3)$ se calculează cu o formulă foarte asemănătoare

$$\cos \psi = \frac{g^{\alpha\beta} m_\alpha n_\beta}{\sqrt{(g^{\gamma\eta} m_\gamma m_\eta) (g^{\xi\zeta} n_\xi n_\zeta)}}. \quad (15.32)$$

Pentru calcularea unghiului χ , dintre direcția cristalografică $[l^1l^2l^3]$ și normala la planul cristalografic $(n_1n_2n_3)$, este necesar, de asemenea, să fie cunoscute componentele tensorului metric

$$\cos \chi = \frac{l^\alpha n_\alpha}{\sqrt{(g_{\beta\gamma} l^\beta l^\gamma) (g^{\xi\eta} n_\xi n_\eta)}}. \quad (15.33)$$

Pentru calcularea tuturor acestor unghiuri, nu este deloc obligatoriu să se cunoască dimensiunile celulei; este suficient să avem date exacte relativ la forma ei. Cu alte cuvinte, nu este nevoie să se cunoască toate componentele tensorului metric, ci este suficient să fie date toate raporturile dintre ele. În particular, forma celulelor elementare ale rețelelor romboedrică și hexagonală este definită doar printr-un singur parametru. Vom examina această problemă mai detaliat.

Problema 8. Raporturile axiale. Tensorul metric romboedric al sistemului de coordonate, $g_{\alpha\beta}$, în cazul alegerii unanim acceptate a celulei elementare, are matricea

$$G = \begin{vmatrix} b^2 & b^2 \cos \alpha & b^2 \cos \alpha \\ b^2 \cos \alpha & b^2 & b^2 \cos \alpha \\ b^2 \cos \alpha & b^2 \cos \alpha & b^2 \end{vmatrix}, \quad (15.34)$$

în care b este lungimea muchiei romboedrului elementar, iar α — unghiul din vârful romboedrului, dintre muchiile sale vecine (v. anexa B). Evident, forma romboedrului (spre deosebire de dimensiunile lui) este determinată tocmai de unghiul α .

Tensorul metric al sistemului de coordonate hexagonal, pe care îl vom nota cu $g_{\alpha'\beta'}$ are matricea

$$G' = \begin{vmatrix} a^2 & -a^2/2 & 0 \\ -a^2/2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{vmatrix}, \quad (15.35)$$

unde a este lungimea muchiilor celulei care se află în planul bazei, iar c este lungimea muchiei paralele cu axa de simetrie principală. Forma celulei este caracterizată de raportul axial c/a .

Așa cum s-a arătat în § 13, un cristal din sistemul trigonal poate fi descris atât în sistemul de coordonate hexagonal, cât și în cel romboedric. În primul caz rețeaua lui va fi caracterizată prin raportul axial c/a , iar în al doilea, de unghiul din vârful romboedrului, α . Să găsim relația care leagă parametrul c/a de parametrul α în cazul în care ei definesc un același cristal.

Tensorii metrici (15.34) și (15.35) sînt legați prin relația (13.23), în care $\|P_{\gamma}^{\alpha}\|$ este matricea trecerii de la sistemul de coordonate romboedric la cel hexagonal, (13.29). Să calculăm $g_{1'1'} = a^2$ și $g_{3'3'} = c^2$. Vom transcrie detaliat calculul lui $g_{1'1'}$. Conform formulei (13.23),

$$g_{1'1'} = P_{1'}^{\alpha} P_{1'}^{\beta} g_{\alpha\beta},$$

sau, în formă dezvoltată,

$$g_{1'1'} = (P_{1'}^1)^2 g_{11} + (P_{1'}^2)^2 g_{22} + (P_{1'}^3)^2 g_{33} + \\ + 2 P_{1'}^2 P_{1'}^3 g_{23} + 2 P_{1'}^3 P_{1'}^1 g_{31} + 2 P_{1'}^1 P_{1'}^2 g_{12}$$

(aici este folosit faptul că tensorul este simetric). Observînd că

$$P_{1'}^1 = -P_{1'}^2 = 1,$$

iar

$$P_{1'}^3 = 0,$$

obținem

$$g_{1'1'} = g_{11} + g_{22} - 2g_{12}$$

și, substituind valorile componentelor tensorului metric din formulele (15.34) și 15.35), vom avea

$$a^2 = 2b^2 (1 - \cos \alpha).$$

Din relația

$$g_{3'3'} = P_{3'}^2 P_{3'}^3 g_{23},$$

efectuînd calcule analoage, obținem

$$c^2 = 3b^2 (1 + 2 \cos \alpha).$$

Așa că, relația căutată va fi de forma

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{3(1 + 2 \cos \alpha)}{2(1 - \cos \alpha)}}, \quad \cos \alpha = \frac{2(c/a)^2 - 3}{2(c/a)^2 + 6}. \quad (15.35)$$

Romboedrii se subîmpart, de obicei, în romboedri alungiți (ascuțiți) — cu unghiul din vîrf ascuțit — și turtiți (obtuzi) — cu unghiul din vîrf obtuz; legătura dintre ei o face romboedrul cu unghiul din vîrf drept, adică cubul. Lui îi corespund unghiul la vîrf $\alpha = 90^\circ$ și raportul axial $c/a = \sqrt{3}/2 \approx 1,225$.

În afară de cub mai pot fi desemnați încă doi romboedri care pot servi drept celule primitive ale rețelei unui cristal din sistemul cubic: în primul rînd, romboedrul alungit cu unghiul din vîrf

$$\alpha = \arccos (1/2) = 60^\circ,$$

căruia îi corespunde raportul axial

$$c/a = \sqrt[3]{6} \approx 2,449,$$

care este celula elementară a rețelei cubice cu fețe centrate, și, în al doilea rând, romboedrul turtit, cu unghiul la vîrf

$$\alpha = \arccos(-1/3) \approx 109^{\circ}28'$$

și cu raportul axial

$$c/a = \sqrt[3]{3/8} \approx 0,6124,$$

care este celula elementară centrată în volum. Aceste rezultate se deduc imediat din forma tensorilor metrici corespunzători (v. anexa B).

Cunoscînd valoarea raportului axial care trebuie să revină rețelei cubice cu fețele centrate, considerată sub aspect hexagonal, este ușor de calculat raportul axial și pentru rețeaua corespunzătoare împachetării hexagonale celei mai compacte. Într-adevăr, în ambele cazuri avem de-a face cu aceleași straturi de împachetare compactă în planul bazei, însă perioada de identitate după direcția perpendiculară pe bază reprezintă trei astfel de straturi, în cazul rețelei cubice cu fețe centrate, și numai două, în cazul împachetării hexagonale celei mai compacte. De aici rezultă că raportul axial în cazul rețelei cu împachetarea hexagonală cea mai compactă este egal cu două treimi din raportul axial al rețelei cubice cu fețe centrate, adică

$$c/a = 2\sqrt[3]{6}/3 \approx 1,633.$$

Pentru o informare mai amănunțită asupra cristalografiei și a diferitelor laturi ale simetriei cristalelor, se pot consulta următoarele cărți: Bhagavhantam și Venkataraiudu (1959); N. V. Belov (1947, 1951); Boki (1971); Boldîrev (1934); Varikaș și Haccatrean (1969); Vasiliev (1972); Veil (1968); Delone, Padurov, Aleksandrov (1934); Jdanov (1940); Zagalskaia și Litvinskaia (1973); Koptîk (1966); Kostov (1965); Lipson și Cocren (1956); Lonsdale (1952); Liubarski (1957); Popov și Șafranovski (1972); Fiodorov (1949); Flint (1956); Șaskolskaia ș.a. (1969 — 1972); Șafranovski (1968); Șubnikov (1940, 1951); Șubnikov, Flint și Boki (1940); Șubnikov și Koptîk (1972); Buerger (1948, 1956, 1970); Burkhardt (1947); International Tables (1952); Kleber (1969).

SISTEME DE COORDONATE, VECTORI
ȘI TENSORI

§ 16. SISTEME DE COORDONATE CARTEZIENE

Proprietatea deosebită a sistemelor de coordonate cristalografice — aceea de a exprima planurile și direcțiile cristalografice prin vectori de componente numere întregi — în numeroase domenii ale fizicii cristalelor nu este esențială, pe cînd faptul că componentele unui vector sau ale unui tensor care definesc un câmp fizic (electric, magnetic, câmpul tensiunilor mecanice) depind nu numai de intensitatea câmpului, ci și de parametrii celulei elementare a cristalului, se resimte ca o serioasă dificultate. Din această cauză, în fizica cristalelor se preferă folosirea de coordonate *carteziene*, a căror proprietate remarcabilă constă în aceea că toți vectorii bazei lor au lungimea egală cu unitatea, fiind ortogonali între ei. Îi vom nota cu e_1, e_2, e_3 și-i vom numi *versori*, iar pentru indici convenim să utilizăm litere latine, $i, j, k, l, m, n, \dots = 1, 2, 3$, nu litere grecești. Produsul scalar al oricărui versor cu el însuși este egal cu unitatea, iar cu alt versor este egal cu zero, adică

$$e_i \cdot e_k = \delta_{ik}, \quad (16.1)$$

însă aceasta înseamnă că pentru un sistem de coordonate cartezian componentele covariante ale tensorului metric sînt definite prin simbolurile lui Kronecker

$$g_{ik} = \delta_{ik}. \quad (16.2)$$

Evident, la fel sînt și componentele contravariante, g^{ik} , iar baza reciprocă coincide cu baza fundamentală

$$e^1 = e_1, e^2 = e_2, e^3 = e_3. \quad (16.3)$$

Din moment ce vectorii bazei contravarianți nu se deosebesc de cei covarianți, este clar că nici componentele contravariante ale vectorilor nu se deosebesc de componentele lor covariante. Dar aceasta înseamnă atunci că se pot scrie toți indicii la același nivel — s-a adoptat să se scrie indicii jos, considerînd că orice indici care se repetă de două ori sînt indici de însumare. Componentele l ,

ale oricărui vector după axele sistemului de coordonate cristalografice, care sînt egale cu produsele scalare dintre acest vector și versorii axelor corespunzătoare,

$$l_i = \mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_i \quad (16.4)$$

nu vor mai depinde deci de parametrii celulei elementare a cristalului : deoarece \mathbf{e}_i este un vector unitar, fiecare dintre componentele l_i este complet definită prin lungimea l a vectorului \mathbf{l} și prin unghiul φ_i , pe care îl face acesta cu axa de coordonate corespunzătoare, X_i ,

$$l_i = l \cos \varphi_i. \quad (16.5)$$

În sistemul de coordonate cartezian se simplifică foarte mult calculul produselor scalar și vectorial dintre vectori precum și al tuturor mărimilor legate de ele. Într-adevăr, în funcție de componentele sistemului cartezian, avem :

pentru produsul scalar al vectorilor \mathbf{p} și \mathbf{q}

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = p_i q_i; \quad (16.6)$$

pentru lungimea vectorului \mathbf{p}

$$p = \sqrt{p_i p_i}; \quad (16.7)$$

pentru unghiul φ dintre vectorii \mathbf{p} și \mathbf{q}

$$\varphi = \arccos \frac{p_i q_i}{\sqrt{p_j p_j q_k q_k}}. \quad (16.8)$$

Componentele produsului vectorial, $\mathbf{s} = \mathbf{p} \times \mathbf{q}$, se calculează după formula

$$s_i = \delta_{ijk} p_j q_k, \quad (16.9)$$

care poate fi scrisă și sub forma

$$\mathbf{s} = \delta_{ijk} p_j q_k \mathbf{e}_i. \quad (16.10)$$

De aici, se deduce imediat că produsul mixt a trei vectori este

$$\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{q}) = \delta_{ijk} r_i p_j q_k. \quad (16.11)$$

Un sistem de coordonate carteziane, orientat într-un anumit fel, bine determinat față de sistemul cristalografic, se numește

sistem de coordonate cristalofizic; fixarea axelor sistemelor de coordonate cristalofizice este dată, pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor, în anexa A.

Vom considera că fiecare dintre sistemele de coordonate care ne interesează este dat prin baza sa: sistemul cristalografic — prin vectorii bazei rețelei, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, iar cel cristalofizic — prin vectorii $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$. Relația dintre sistemul de coordonate cristalofizic și sistemul de coordonate cristalografic este complet definită prin coeficienții descompunerii vectorilor dintr-o bază după vectorii celeilalte baze: descompunerea vectorilor fundamentali ai unei rețele după vectorii sistemului cristalofizic este dată de relația

$$\mathbf{a}_\alpha = A_{\alpha i} \mathbf{e}_i, \quad (16.12)$$

au, viceversa, descompunerea acestor vectori după vectorii fundamentali ai rețelei va fi

$$\mathbf{e}_i = E_i^\alpha \mathbf{a}_\alpha. \quad (16.13)$$

Matricele formate din coeficienții dezvoltării, $\|A_{\alpha i}\|$ și $\|E_i^\alpha\|$ sînt inverse între ele

$$A_{\alpha i} E_i^\beta = \delta_\alpha^\beta, \quad E_i^\alpha A_{\alpha j} = \delta_{ij}. \quad (16.14)$$

Prin definiție (vezi § 11), componentele covariante ale tensorului metric sînt $g_{\alpha\beta} = \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta$. Înlocuind aici expresia (16.12) obținem

$$g_{\alpha\beta} = A_{\alpha i} A_{\beta i}. \quad (16.15)$$

Analog, vom găsi că

$$g^{\alpha\beta} = E_i^\alpha E_i^\beta. \quad (16.16)$$

Conform formulei (13.14), determinantul matricei de transformare de la o bază la alta este egal cu raportul dintre volumele celulelor construite pe vectorii bazei. Prin urmare,

$$\det \|A_{\alpha i}\| = v; \quad \det \|E_i^\alpha\| = 1/v, \quad (16.17)$$

v fiind volumul celulei elementare. Deoarece însă, după formula (16.15)

$$\det G = (\det \|A_{\alpha i}\|)^2,$$

rezultă că

$$\det G = v^2. \quad (16.18)$$

Trecerea de la sistemul de coordonate cristalografic la sistemul cristalofizic, ca și trecerea inversă, sînt cazuri particulare

ale trecerilor de la o bază vectorială la alta, tratate amănunțit în paragraful 13. Trebuie numai să se țină seama de faptul că sistemul de coordonate cristalografic, direcțiile și planurile sînt definite prin vectorii $l = l^\alpha a_\alpha$ și $n = n_\alpha a^\alpha$, ale căror lungimi sînt determinate din condiția ca componentele l^α și n_α să fie numere întregi și să nu aibă factori comuni. Dimpotrivă, în sistemele de coordonate cristalofizice, de regulă, toate direcțiile sînt date prin vectori de lungime egală cu unitatea, astfel încît l_i și n_i sînt componentele vectorilor unitari care definesc direcțiile respective. Obținem astfel următorul tabel

Mărimile care se compară	Trecerea de la sistemul cristalografic la sistemul cristalofizic	Trecerea de la sistemul cristalofizic la sistemul cristalografic
Vectorii bazei rețelei, a_α , și versorii, e_i	$e_i = E_i^\alpha a_\alpha$	$a_\alpha = A_{\alpha i} e_i$
Vectorii bazei rețelei reciproce, a^α , și versorii, e_i	$e_i = A_{\alpha i} a^\alpha$	$a^\alpha = E_i^\alpha e_i$
Indicii planurilor (fețelor), n_α , și componentele vectorului unitar, n_i	$n_i = \frac{E_i^\alpha n_\alpha}{\sqrt{g_{\beta\gamma} n_\beta n_\gamma}}$	$n_\alpha = \lambda A_{\alpha i} n_i$
Indicii direcțiilor (muchiiilor), l^α , și componentele vectorului unitar, l_i	$l_i = \frac{A_{\alpha i} l^\alpha}{\sqrt{g_{\beta\gamma} l^\beta l^\gamma}}$	$l^\alpha = \lambda E_i^\alpha l_i$

Coeficienții λ sînt aleși astfel încît indicii să fie întregi și să nu aibă un factor comun.

Matricele $\|A_{\alpha i}\|$ și $\|E_i^\alpha\|$ pentru toate sistemele cristalografice sînt date în anexa B.

§ 17. TRANSFORMĂRI ORTOGONALE

Pentru rezolvarea unor probleme ale fizicii cristalelor deseori nu este convenabil sistemul cristalofizic, ci un alt sistem de coordonate cartezian oarecare, ale cărui direcții ale axelor sînt definite prin geometria problemei respective. Deoarece un sistem de coordonate cartezian este complet definit prin baza sa ortonormată, transformarea coordonatelor carteziene nu reprezintă altceva decît trecerea de la o bază ortonormată la alta. Astfel de transformări se numesc *transformări ortogonale*.

Fie sistemul de coordonate „vechi”, X_1, X_2, X_3 , construit pe baza e_1, e_2, e_3 , iar sistemul „nou” X_1', X_2', X_3' , pe baza e_1', e_2', e_3' . Dezvoltarea bazei noi după vectorii celei vechi,

$$e_i' = c_{i'k} e_k, \quad (17.1)$$

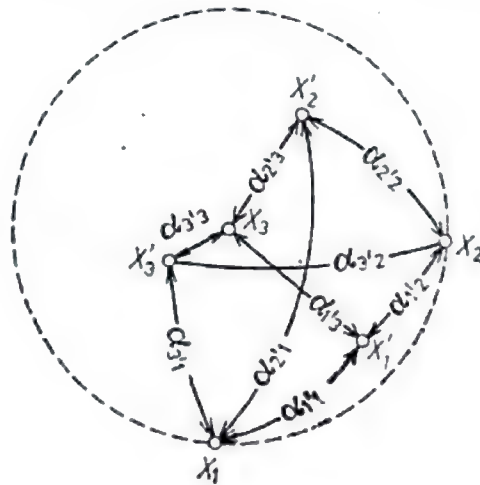
este determinată de coeficienții c_{ik} , care formează *matricea transformării ortogonale*

$$\|c_{ik}\| = \begin{vmatrix} c_{1'1} & c_{1'2} & c_{1'3} \\ c_{2'1} & c_{2'2} & c_{2'3} \\ c_{3'1} & c_{3'2} & c_{3'3} \end{vmatrix}.$$

Ea se mai numește și *matricea cosinurilor*, deoarece fiecare element al ei reprezintă cosinusul unghiului dintre axele de coordonate corespunzătoare (fig. 17.1)

$$c_{i'k} = \mathbf{e}_{i'} \cdot \mathbf{e}_k = \cos (X_{i'}, X_k) = \cos \alpha_{i'k}. \quad (17.2)$$

Fig. 17.1. Unghiurile α_{ik} dintre axele de coordonate „vechi” și „noi”; proiecție stereografică



Transformarea inversă,

$$\mathbf{e}_k = c_{ki'} \mathbf{e}_{i'}, \quad (17.3)$$

este dată evident, prin matricea $\|c_{ki'}\|$, fiind totodată și inversa matricei inițiale, $\|c_{i'k}\|$, și transpusa ei. Astfel de matrice satisfac relațiile

$$c_{i'k} c_{j'k} = \delta_{i'j'}, \quad c_{i'k} c_{i'l} = \delta_{kl}, \quad (17.4)$$

și se numesc *matrice ortogonale*. Pătratul determinantului unei asemenea matrice este egal cu unitatea, sau

$$\Delta = \det \|c_{ik}\| = \pm 1. \quad (17.5)$$

Transformările ortogonale se subîmpart în *transformări proprii* (rotațiile) și *transformări improprii* (rotațiile cu inversie). Celor dintii le corespund matrice cu determinantul +1, pe cînd celorlalte, cu determinantul -1.

Orice rotație R poate fi definită prin axa de rotație și un unghi de rotație în jurul ei. Prin urmare, pentru definirea oricărei rotații este suficient un vector φ , a cărui direcție să coincidă cu axa de rotație, mărimea lui, φ , fiind egală cu unghiul de rotație. Vom conveni, de asemenea, că rotația $R(\varphi)$ în jurul vectorului φ se face în sensul șurubului drept. Vom ține seama de toate rotațiile posibile, dacă vom considera toți vectorii φ posibili, a căror lungime satisface inegalitatea $0 \leq \varphi \leq \pi$. În această situație, fiecărei rotații cu un unghi mai mic decât π , îi va corespunde un singur vector de acesta, iar pentru un unghi egal cu π — doi vectori egali ca mărime, dar de sensuri contrare. Rotația $R(\varphi)$ se notează cel mai des cu $R(\mathbf{k}, \varphi)$, unde $\mathbf{k} = \varphi/\varphi$ este vectorul unitar al direcției φ .

Dacă noul sistem de coordonate cartezian, construit pe baza ortonormată, $\mathbf{e}_1', \mathbf{e}_2', \mathbf{e}_3'$, se obține din sistemul vechi, construit pe baza $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, prin aplicarea unei rotații $R(\mathbf{k}, \varphi)$, atunci matricea $\|r_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\|$, corespunzătoare acestei rotații, adică matricea care definește dezvoltarea $\mathbf{e}_{i'} = r_{i'j} \mathbf{e}_j$ este următoarea *

$$\begin{vmatrix} \cos \varphi + k_1^2(1 - \cos \varphi) & k_3 \sin \varphi + k_1 k_2(1 - \cos \varphi) & -k_2 \sin \varphi + k_1 k_3(1 - \cos \varphi) \\ -k_3 \sin \varphi + k_2 k_1(1 - \cos \varphi) & \cos \varphi + k_2^2(1 - \cos \varphi) & k_1 \sin \varphi + k_2 k_3(1 - \cos \varphi) \\ k_2 \sin \varphi + k_2 k_1(1 - \cos \varphi) & -k_1 \sin \varphi + k_3 k_2(1 - \cos \varphi) & \cos \varphi + k_3^2(1 - \cos \varphi) \end{vmatrix}.$$

Folosind simbolurile lui Kronecker și Levi-Civita, elementele ei se scriu sub forma

$$r_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi) = \delta_{i'j} \cos \varphi + \delta_{i'jk} k_l \sin \varphi + k_{i'} k_j (1 - \cos \varphi). \quad (17.6)$$

În formula (17.6) $k_{i'}$, și k_j sînt componentele vectorului \mathbf{k} în sistemele nou și, respectiv, vechi, însă deoarece un sistem se obține din celălalt printr-o rotație tocmai în jurul acestui vector, componentele vor coincide: $k_{1'} = k_1, k_{2'} = k_2, k_{3'} = k_3$.

Pentru unghiuri de rotație mici ($\varphi \ll 1$)

$$r_{i'j}(\varphi) \approx \delta_{i'j} + \delta_{i'jk} \varphi_k. \quad (17.7)$$

Rotația cu inversie cu unghiul φ în jurul unui vector unitar \mathbf{k} reprezintă produsul dintre rotația respectivă propriu-zisă și transformarea de inversie

$$Q(\mathbf{k}, \varphi) = \bar{I} \cdot R(\mathbf{k}, \varphi).$$

* Pentru deducerea primei linii a acestei matrice este suficient să avem vectorul $\mathbf{e}_{1'}$ — rezultatul rotației vectorului \mathbf{e}_1 în jurul lui \mathbf{k} cu unghiul φ — și să se calculeze produsele scalare $\mathbf{e}_{i'} \cdot \mathbf{e}_j$. Linia a doua și a treia se obțin imediat din prima linie prin permutări ciclice.

Prin urmare, matricea ei, $\|q_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\|$, este produsul dintre matricea $\|r_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\|$ și matricea inversiei, $\|-\delta_{i'j}\|$, adică

$$\|q_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\| = \|-\delta_{i'j} r_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\|.$$

Rezultă deci că forma generală a matricei unei transformări ortogonale este

$$c_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi) = \Delta[\delta_{i'j} \cos \varphi + \delta_{i'j} k_i \sin \varphi + k_i k_j (1 - \cos \varphi)], \quad (17.8)$$

unde $\Delta = \pm 1$, astfel că $\Delta = +1$ corespunde rotației proprii, iar $\Delta = -1$ rotației cu inversie.

În tabelul 17.1 sînt date matricele transformărilor cristalografice de simetrie atît în forma lor generală cît și în cazul în care axele de rotație sînt luate într-un mod special, cel mai des folosit în cristalografie și în fizica cristalelor.

Urma (de la cuvîntul englezesc *trace* — urmă; se folosește și notația *Sp*, de la cuvîntul din limba germană *Spur*), adică suma elementelor diagonale ale matricei $\|c_{i'j}(\mathbf{k}, \varphi)\|$ se notează $\text{tr}\|c_{i'j}\|$ fiind egală cu

$$c_{ii} = \Delta(1 + 2 \cos \varphi).$$

De aici

$$\cos \varphi = \frac{1}{2}(\Delta c_{ii} - 1). \quad (17.9)$$

Deoarece unghiul φ variază între limitele $(0, \pi)$ formula (17.9) permite determinarea lui complet univocă. Putem afla acum fără nici o dificultate și vectorul unitar al axei de rotație, \mathbf{k}

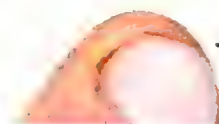
$$k_i = \frac{\Delta}{2 \sin \varphi} \delta_{i'j} c_{i'j}. \quad (17.10)$$

Acastă formulă este valabilă numai în cazul $\varphi \neq \pi$. Pentru $\varphi = \pi$, așa cum rezultă din tabelul 17.1, componentele k_i pot fi determinate folosind relațiile

$$k_1 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{1'1} + 1}{2}}, \quad k_2 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{2'2} + 1}{2}}, \quad k_3 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{3'3} + 1}{2}} \quad (17.11)$$

semnele trebuind să fie luate astfel încît

$$k_i k_j = \frac{1}{2} \Delta c_{i'j}. \quad (17.12)$$



Tabelul 17.1

Matricele transformărilor de simetrie cristalografice și a celor limită, în cazul alegerii arbitrare și în cazul alegerii speciale a vectorului unitar al axei de rotație, k

	1	$\bar{1}$
	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$
	2	m
	$\begin{vmatrix} 2k_1^2 - 1 & 2k_1k_2 & 2k_3k_1 \\ 2k_1k_2 & 2k_2^2 - 1 & 2k_2k_3 \\ 2k_3k_1 & 2k_2k_3 & 2k_3^2 - 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 - 2k_1^2 & -2k_1k_2 & -2k_3k_1 \\ -2k_1k_2 & 1 - 2k_2^2 & -2k_2k_3 \\ -2k_3k_1 & -2k_2k_3 & 1 - 2k_3^2 \end{vmatrix}$
$k = e_1$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$
$k = e_1$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
$k = e_2$	$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
$k = \frac{e_1 + e_2}{\sqrt{2}}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
$k = \frac{e_1 - e_2}{\sqrt{2}}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
$k = e_1 \cos \psi + e_2 \sin \psi$	$\begin{vmatrix} \cos 2\psi & \sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & -\cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$
	4	$\bar{4}$
	$\begin{vmatrix} k_1^2 & k_1k_2 + k_3 & k_3k_1 - k_2 \\ k_1k_2 - k_3 & k_2^2 & k_2k_3 + k_1 \\ k_3k_1 + k_2 & k_2k_3 - k_1 & k_3^2 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} -k_1^2 & -k_3 - k_1k_2 & k_2 - k_3k_1 \\ k_3 - k_1k_2 & -k_2^2 & -k_1 - k_2k_3 \\ -k_2 - k_3k_1 & k_1 - k_2k_3 & -k_3^2 \end{vmatrix}$
$k = e_3$	$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$	$\begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$

Tabelul 17.1 (continuare)

$\bar{3}$			$\bar{3}$		
$\frac{3k_1^2 - 1}{2}$	$\frac{3k_1k_2 + k_3\sqrt{3}}{2}$	$\frac{3k_3k_1 - k_3\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1 - 3k_1^2}{2}$	$\frac{-k_3\sqrt{3} - 3k_1k_2}{2}$	$\frac{k_2\sqrt{3} - 3k_3k_1}{2}$
$\frac{3k_1k_2 - k_3\sqrt{3}}{2}$	$\frac{3k_2^2 - 1}{2}$	$\frac{3k_2k_3 + k_1\sqrt{3}}{2}$	$\frac{k_2\sqrt{3} - 3k_1k_2}{2}$	$\frac{1 - 3k_2^2}{2}$	$\frac{-k_1\sqrt{3} - 3k_2k_3}{2}$
$\frac{3k_3k_1 + k_2\sqrt{3}}{2}$	$\frac{3k_2k_3 - k_1\sqrt{3}}{2}$	$\frac{3k_3^2 - 1}{2}$	$\frac{-k_2\sqrt{3} - 3k_3k_1}{2}$	$\frac{k_1\sqrt{3} - 3k_2k_3}{2}$	$\frac{1 - 3k_3^2}{2}$
$k = e_3$			$k = e_3$		
$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
0	0	1	0	0	1
$k = \frac{e_1 + e_2 + e_3}{\sqrt{3}}$			$k = \frac{e_1 + e_2 + e_3}{\sqrt{3}}$		
0	1	0	0	-1	0
0	0	1	0	0	-1
1	0	0	-1	0	0
$k = \frac{-e_1 + e_2 + e_3}{\sqrt{3}}$			$k = \frac{-e_1 + e_2 + e_3}{\sqrt{3}}$		
0	0	-1	0	0	1
-1	0	0	1	0	0
0	1	0	0	-1	0
$\bar{6}$			$\bar{6}$		
$\frac{1 + k_1^2}{2}$	$\frac{k_1k_2 + k_3\sqrt{3}}{2}$	$\frac{k_3k_1 - k_2\sqrt{3}}{2}$	$\frac{-1 - k_1^2}{2}$	$\frac{-k_3\sqrt{3} - k_1k_2}{2}$	$\frac{k_2\sqrt{3} - k_3k_1}{2}$
$\frac{k_1k_2 - k_3\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1 + k_2^2}{2}$	$\frac{k_2k_3 + k_1\sqrt{3}}{2}$	$\frac{k_3\sqrt{3} - k_1k_2}{2}$	$\frac{-1 - k_2^2}{2}$	$\frac{-k_1\sqrt{3} - k_2k_3}{2}$
$\frac{k_3k_1 + k_2\sqrt{3}}{2}$	$\frac{k_2k_3 - k_1\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1 + k_3^2}{2}$	$\frac{-k_2\sqrt{3} - k_3k_1}{2}$	$\frac{k_1\sqrt{3} - k_2k_3}{2}$	$\frac{-1 - k_3^2}{2}$
$k = e_3$			$k = e_3$		
$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	0
$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
0	0	1	0	0	-1
$R(e_3, \varphi)$			$\bar{1} R(e_3, \varphi)$		
$\cos \varphi$	$\sin \varphi$	0	$-\cos \varphi$	$-\sin \varphi$	0
$-\sin \varphi$	$\cos \varphi$	0	$\sin \varphi$	$-\cos \varphi$	0
0	0	1	0	0	-1

Astfel, cunoscând axa și mărimea rotației, se pot calcula elementele matricei $\|e_{i'j}\|$, și viceversa, cunoscând elementele matricei, se pot determina cu ajutorul relațiilor (17.9)–(17.12) axa de rotație și unghiul de rotație.

Rezultatul efectuării a două transformări ortogonale consecutive — trecerea de la baza veche, e_1, e_2, e_3 , la una nouă, $e_{1'}, e_{2'}, e_{3'}$, și după aceasta, de la baza nouă, la una „și mai nouă”, $e_{1''}, e_{2''}, e_{3''}$ — se poate scrie sub forma

$$e_{i''} = c_{i''k} e_k,$$

astfel încît $C = \|c_{i''k}\|$, care realizează trecerea directă de la baza veche la cea și mai nouă, se exprimă prin matricea fiecărei treceri

$$C^{(1)} = \|c_{j'k}\|$$

și

$$C^{(2)} = \|c_{i''j'}\|,$$

prin relația

$$c_{i''k} = c_{i''j'} c_{j'k}. \quad (17.13)$$

Această formulă poate fi scrisă sub formă de egalitate matriceală, $C = C^{(2)}C^{(1)}$; în acest caz este necesar să se țină seama de ordinea factorilor: matricea care corespunde transformării efectuate mai înainte se scrie mai la dreapta.

Efectuarea succesivă a unor operații se aplică, în particular, la scrierea trecerii de la un sistem de coordonate, la altul, prin intermediul unghiurilor Euler. Rotația care duce sistemul de coordonate $OX_1X_2X_3$ în sistemul $OX'_1X'_2X'_3$ se poate realiza prin următorul șir de operații succesive.

1. Îndreptăm axa ajutătoare Y_1 după dreapta de intersecție a planurilor OX_1X_2 și $OX'_1X'_2$. Alegem sensul pozitiv pe axa Y_1 astfel ca unghiul $\varphi = \angle X_1OY_1$, măsurat în sensul de la X_1 la X_2 , să fie cuprins între limitele $0 \leq \varphi < \pi$. Rotația sistemului de coordonate $OX_1X_2X_3$ în jurul axei X_3 cu unghiul φ îl transpune în sistemul $OY_1Y_2X_3$. Matricea acestei rotații este

$$R^{(\varphi)} = \begin{vmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

2. Rotația în jurul axei Y_1 cu unghiul $\theta = \angle X_3 O X'_3$ (acesta se măsoară dinspre X_3 spre Y_2) transpune sistemul $OY_1Y_2X_3$ în sistemul $OY_1Y'_2X'_3$. Matricea acestei rotații este

$$R^{(\theta)} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix}.$$

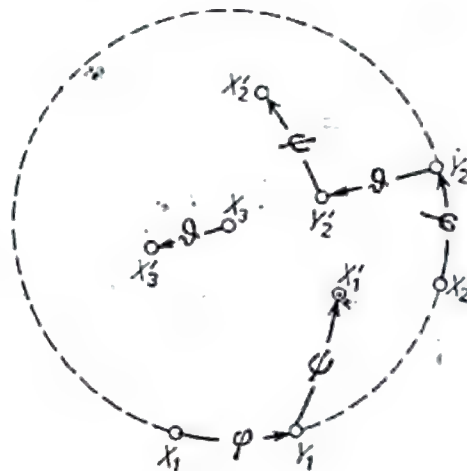
3. În sfârșit, rotația în jurul axei X'_3 cu unghiul ψ , măsurat de la Y_1 la Y'_2 , transpune sistemul $OY_1Y'_2X'_3$ în sistemul $OX'_1X'_2X'_3$. Matricea lui este

$$R^{(\psi)} = \begin{vmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Evident, aceste trei rotații pot fi înlocuite printr-o singură rotație (fig. 17.2), care transpune sistemul $OX_1X_2X_3$ în sistemul $OX'_1X'_2X'_3$. Matricea acestei rotații este

$$R = R^{(\psi)} R^{(\theta)} R^{(\varphi)}.$$

Fig. 17.2. Unghiurile Euler, proiecție stereografică: $\varphi = 30^\circ$, $\theta = 40^\circ$, $\psi = 50^\circ$.



Înmulțind matricele în ordinea indicată, obținem

$$R = \begin{vmatrix} \cos \varphi \cos \psi - \sin \varphi \cos \theta \sin \psi & \sin \varphi \cos \psi + \cos \varphi \cos \theta \sin \psi & -\sin \theta \sin \psi \\ -\cos \varphi \sin \psi - \sin \varphi \cos \theta \cos \psi & -\sin \varphi \sin \psi + \cos \varphi \cos \theta \cos \psi & -\sin \theta \cos \psi \\ -\sin \varphi \sin \theta & \cos \varphi \sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix} \quad (17.14)$$

Mai sus au fost examinate trei mijloace de calculare a matricei unei transformări ortogonale de coordonate cele mai utilizate. Dacă sînt cunoscute unghiurile dintre axele noi și cele vechi, se utilizează formula (17.2); dacă este cunoscută transformarea care transpune sistemul vechi în cel nou, se utilizează formula (17.8); în fine, dacă sînt date unghiurile Euler, se folosește formula (17.14).

§ 18. TENSORII DE RANGUL DOI

După cum se știe, în cazul trecerii de la o bază e_k la o bază $e_{i'} = c_{i'k} e_k$, componentele v_k ale unui vector v , se transformă după legea

$$v_{i'} = c_{i'k} v_k, \quad v_k = c_{i'k} v_{i'}. \quad (18.1)$$

Cele nouă mărimi T_{kl} , care se transformă ca produsele componentelor a doi vectori, adică după legea

$$T_{i'j'} = c_{i'k} c_{j'l} T_{kl}, \quad T_{kl} = c_{i'k} c_{j'l} T_{i'j'}, \quad (18.2)$$

se numesc *componentele tensorului de rangul doi*, T . Analog, cele $3^3 = 27$ mărimi Q_{lmn} , care se transformă ca produsele componentelor a trei vectori,

$$Q_{i'j'k'} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} Q_{lmn}, \quad Q_{lmn} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} Q_{i'j'k'} \quad (18.3)$$

se numesc *componentele tensorului de rangul trei*, Q , ș.a.m.d.

După cum vectorul v se scrie sub forma $v = v_i \cdot e_i$, componentele lui fiind $v_i = v \cdot e_i$, tensorul T poate fi reprezentat sub forma (un tensor de forma $e_k e_l$ — în cazul general ab — se numește *diadă*; astfel, în relația (18.4) tensorul T este reprezentat ca suma a nouă diade)

$$T = e_k T_{kl} e_l \quad (18.4)$$

(sau $T_{kl} e_k e_l$). În acest caz, componentele lui, T_{kl} , în baza e_k se calculează după formula

$$T_{kl} = e_k \cdot T \cdot e_l. \quad (18.5)$$

Componentele $T_{i'j'}$ ale aceluiași tensor în baza $e_{i'} = c_{i'k} e_k$ sînt egale cu

$$T_{i'j'} = e_{i'} \cdot T \cdot e_{j'}.$$

Înlocuind aici expresia (18.4) și observînd că

$$e_{i'} \cdot e_k = c_{i'k},$$

ajungem la formula (18.2). Aceasta arată că legea de transformare (18.2) a componentelor tensoriale T_{kl} este formulată astfel încât tensorul definit prin aceste componente, $e_k T_{kl} e_l$, să fie, ca și vectorul, o entitate geometrică, adică să nu depindă de sistemul de coordonate în care este definit.

Tensorul de rangul doi joacă rolul de operator liniar, care transpune o mulțime u într-o altă mulțime a lor, $v = v(u)$, astfel încât

$$v(\lambda u^{(1)} + \mu u^{(2)}) = \lambda v(u^{(1)}) + \mu v(u^{(2)}), \quad (18.6)$$

unde $u^{(1)}$ și $u^{(2)}$ sînt orice vectori din mulțimea u , iar λ și μ sînt numere reale arbitrare. Din relația (18.6) rezultă că în orice bază ortogonală e_k componentele v_k ale vectorilor v sînt funcții liniare ale componentelor u_l , ale vectorilor u corespunzători

$$v_k = T_{kl} u_l. \quad (18.7)$$

În baza $e_{i'} = c_{i'k} e_k$, această dependență capătă forma

$$v_{i'} = T_{i'j'} u_{j'},$$

iar din faptul că componentele vectoriale u_l și v_k se transformă după legea (18.1), rezultă că coeficienții T_{kl} se transformă după formulele (18.2), adică sînt într-adevăr componente ale tensorului de rangul doi, \mathbf{T} . De aici rezultă că relația (18.7) poate fi scrisă într-o formă independentă de coordonate

$$v = \mathbf{T} \cdot u. \quad (18.8)$$

Să examinăm unele cazuri speciale de transformări liniare ale mulțimilor vectoriale. Dacă vectorii v sînt pur și simplu egali cu vectorii u , tensorul corespunzător se numește *tensor unitar* și se notează cu \mathbf{I} . Componentele tensorului unitar vor fi, în orice sistem de coordonate,

$$I_{kl} = \delta_{kl}.$$

Dacă vectorii v sînt coliniari cu vectorii u fiind de λ ori mai mari, dependența liniară a vectorilor v față de u se realizează de către tensorul $\lambda \mathbf{I}$ (tensorii de o seamene formă se numesc *tensori sferici*). Scrierii $v = \lambda \mathbf{I} \cdot u$ îi este echivalentă scrierea mai simplă $v = \lambda u$.

O componentă a oricărui vector u , paralelă cu un vector unitar dat, k , poate fi scrisă sub forma $kk \cdot u$. Astfel, tensorul kk realizează proiecția vectorilor pe dreapta paralelă cu vectorul unitar k . Analog, proiecția vectorilor pe un plan perpendicular pe un vector unitar k se realizează prin intermediul tensorului $\mathbf{I} - kk$.

rotația vectorilor în jurul axei \mathbf{k} cu unghiul φ se realizează cu ajutorul tensorului

$$\mathbf{R}(\mathbf{k}, \varphi) = \mathbf{I} \cos \varphi - \mathbf{I} \times \mathbf{k} \sin \varphi + \mathbf{k}\mathbf{k} (1 - \cos \varphi), \quad (18.9)$$

$$R_{ij} = \delta_{ij} \cos \varphi + \delta_{ijl} k_l \sin \varphi + k_i k_j (1 - \cos \varphi).$$

Aceasta rezultă din formula (17.6) (produsul vectorial al unui tensor \mathbf{T} cu un vector \mathbf{v} se definește analog produsului scalar: dacă $\mathbf{T} = \mathbf{e}_k T_{kl} \mathbf{e}_l$, atunci $\mathbf{T} \times \mathbf{v} = \mathbf{e}_k T_{kl} (\mathbf{e}_l \times \mathbf{v})$).

Dacă determinantul tensorului \mathbf{T} este diferit de zero, dependența liniară $\mathbf{v} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{u}$ poate fi transformată

$$\mathbf{u} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{v}, \quad u_j = P_{jk} v_k.$$

Tensorul \mathbf{P} , avînd componentele

$$P_{jk} = \frac{\tau_{kj}}{\det \mathbf{T}}, \quad (18.10)$$

în care τ_{kj} , suplimentul algebric al elementului T_{kj} din determinantul $\det \|\mathbf{T}_{kl}\|$, se numește *inversul* tensorului \mathbf{T} ; acesta se notează $\mathbf{P} = \mathbf{T}^{-1}$. Tensorii inverși (unul altuia) satisfac identitățile

$$T_{ij} P_{jk} = \delta_{ik}, \quad P_{jk} T_{kl} = \delta_{jl}. \quad (18.11)$$

Tensorii care proiectează vectorii pe o dreaptă sau pe un plan nu au tensori inverși, pe cînd tensorul $\mathbf{R}(\mathbf{k}, \varphi)$, care rotește vectorii, are tensor invers.

Ca și matricea, un tensor de rangul doi poate fi transpus. Dacă un tensor nu se schimbă prin transpunerea ($\mathbf{T}^* = \mathbf{T}$), atunci el se numește *tensor simetric*, iar dacă prin aceasta își schimbă semnul ($\mathbf{T}^* = -\mathbf{T}$), se numește *tensor antisimetric*. Orice tensor \mathbf{T} se descompune într-o *parte simetrică*,

$$\mathbf{S} = 1/2 (\mathbf{T} + \mathbf{T}^*),$$

și o *parte antisimetrică*

$$\mathbf{A} = 1/2 (\mathbf{T} - \mathbf{T}^*);$$

suma lor este egală cu tensorul inițial, \mathbf{T} .

Un tensor simetric, S_{ij} , se descompune, la rîndul său, într-o *parte sferică*, $1/3 S_{kk} \delta_{ij}$, și un *deviator*,

$$D_{ij} = S_{ij} - 1/3 S_{kk} \delta_{ij}.$$

Urma părții sferice este egală cu urma tensorului, iar urma deviatorului, cu zero; în general, orice tensor simetric de rangul doi, a cărui urmă este egală cu zero, se numește *deviator*.

Tensorii de rangul doi pot fi considerați și ca rezultat al diferențierii unui vector în raport cu un vector sau ca o diferențiere dublă a unei funcții scalare în raport cu un vector. Să examinăm, mai întâi, operația mai simplă — diferențierea unei funcții scalare în raport cu un vector. Dacă f este o funcție scalară de componente ale vectorului u (și, eventual de alți parametri), mărimile

$$v_k = \frac{\partial f}{\partial u_k} \quad (18.12)$$

se transformă ca niște componente ale unui vector. Acest fapt permite ca (18.12) să fie scris sub forma

$$\mathbf{v} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}},$$

cu care se subliniază independența acestei operații de alegerea sistemului de coordonate.

Analog se definește derivarea unui vector în raport cu un vector. Dacă componentele unui vector \mathbf{v} sînt funcții de componentele unui vector \mathbf{u} , cele nouă mărimi

$$T_{ki} = \frac{\partial v_k}{\partial u_i} \quad (18.13)$$

se transformă ca componentele unui tensor de rangul doi. Prin urmare, (18.13) poate fi scrisă sub forma

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{u}}.$$

Tot tensor de rangul doi este și derivata a doua a unei funcții f în raport cu argumentele vectoriale ale ei, \mathbf{u} și \mathbf{v}

$$\mathbf{T} = \frac{\partial^2 f}{\partial u \partial v}, \quad T_{ki} = \frac{\partial^2 f}{\partial u_k \partial v_i}.$$

Dacă însă această derivată de ordinul doi se face după unul și același argument, adică $\mathbf{T} = \partial^2 f / (\partial \mathbf{u} \partial \mathbf{u})$, atunci tensorul \mathbf{T} este simetric.

§ 19. VECTORII PROPRII ȘI VALORILE PROPRII ALE UNUI TENSOR SIMETRIC DE RANGUL DOI

Un tensor de rangul doi, S , care înmulțește scalar un vector u , îl transformă în vectorul $v = S \cdot u$. Acei vectori care la această operație nu își modifică direcția, schimbându-și numai lungimea (se lungesc sau se scurtează), se numesc *vectorii proprii* ai tensorului S (fig. 19.1). Ei satisfac, prin urmare, ecuația

$$S \cdot u = Su, \quad S_{ik} u_k = Su_i, \quad (19.1)$$

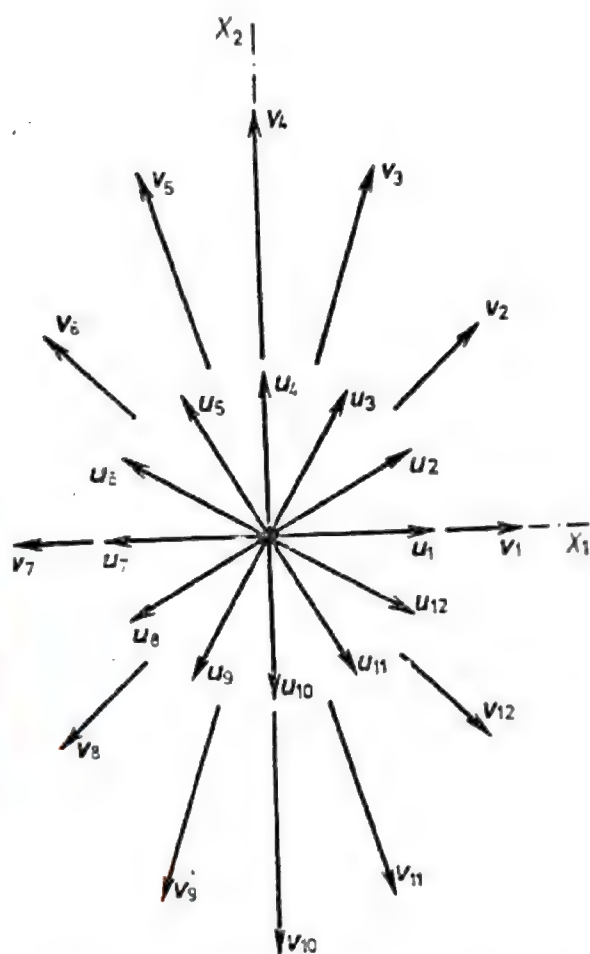


Fig. 19.1. Acțiunea tensorului simetric $S = 3/2 e_1 e_1 + 5/2 e_2 e_2$ asupra vectorilor u_1, \dots, u_{12} ; $v_i = S u_i$. u_1, u_4, u_7 și u_{10} sînt vectorii proprii ai tensorului S .

în care S este un număr care arată de cîte ori se mărește vectorul u sub acțiunea tensorului S și se numește *valoarea proprie* a tensorului S , care corespunde vectorului propriu dat.

Dacă un anumit vector u satisface această ecuație, atunci ea va fi satisfăcută și de orice vector coliniar cu el. Rezultă, prin urmare, că se poate vorbi despre direcții proprii ale tensorului; direcția este dată, firește, printr-un vector unitar. Vom impune deci vectorului u condiția suplimentară

$$u \cdot u = u_i u_i = 1. \quad (19.2)$$

Transcriind ecuația (19.1) sub forma

$$(S - SI) \cdot u = 0, \quad (19.3)$$

$$(S_{ik} - S\delta_{ik}) u_k = 0,$$

vedem că acestea constituie trei ecuații liniare omogene în componentele vectorului u . Ele sînt verificate, firește, de soluția banală, $u = 0$; aceasta nu definește, totuși, nici o direcție. După cum se știe, pot exista alte soluții ale sistemului linear omogen care să nu fie banale, numai dacă determinantul sistemului este nul

$$\det (S - SI) = \begin{vmatrix} S_{11} - S & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} - S & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} - S \end{vmatrix} = 0. \quad (19.4)$$

Deoarece tensorul S este dat, condiția (19.4) reprezintă de fapt ecuația pe care trebuie să o satisfacă valoarea proprie S . Ecuația (19.4) se numește *ecuația caracteristică a tensorului*. Întrucît componentele unui tensor sînt mărimi reale, această ecuație de gradul trei are, fie o rădăcină reală și două rădăcini imaginare complex-conjugate, fie trei rădăcini reale, iar în cazul în care tensorul este simetric, se realizează numai a doua posibilitate. Într-adevăr, o rădăcină reală, cum este $S_{(3)}$, oricum există. Să presupunem că am aflat-o. Atunci, din sistemul de ecuații liniare

$$(S_{ik} - S_{(3)}\delta_{ik})u_k^{(3)} = 0,$$

putem găsi și vectorul unitar $u^{(3)}$, care corespunde valorii proprii, $S_{(3)}$. Să introducem un sistem de coordonate carteziane, X_1, X_2, X_3 , avîndu-l drept versor e_3 pe $u^{(3)}$. Este ușor de verificat că în acest sistem tensorul S are forma

$$\|S_{j' i'}\| = \begin{vmatrix} S_{1'1'} & S_{1'2'} & 0 \\ S_{1'2'} & S_{2'2'} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{vmatrix} \quad (19.5)$$

(pentru aceasta se face uz mai ales de simetria lui). Prin urmare, ecuația (19.4) poate fi scrisă în felul următor

$$\begin{vmatrix} S_{1'1'} - S & S_{1'2'} & 0 \\ S_{1'2'} & S_{2'2'} - S & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} - S \end{vmatrix} = 0.$$

Calculind acest determinant găsim alte două valori proprii

$$S_{(1,2)} = \frac{1}{2} [(S_{1'1'} + S_{2'2'}) \pm \sqrt{(S_{1'1'} - S_{2'2'})^2 + (2S_{1'2'})^2}]. \quad (19.6)$$

Deoarece expresia de sub radical, fiind suma a două pătrate, este pozitivă și aceste două rădăcini vor fi reale, ceea ce trebuie demonstrat.

Vectorii proprii care corespund diferitelor valori proprii sunt ortogonali între ei. Într-adevăr, înmulțind scalar ecuațiile pentru vectorii proprii

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}^{(1)} = S_{(1)} \mathbf{u}^{(1)}, \quad \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}^{(2)} = S_{(2)} \mathbf{u}^{(2)}$$

cu $\mathbf{u}^{(2)}$ și, respectiv, cu $\mathbf{u}^{(1)}$ și scăzând una din cealaltă, obținem

$$\mathbf{u}^{(2)} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}^{(1)} - \mathbf{u}^{(1)} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}^{(2)} = (S_{(1)} - S_{(2)}) \mathbf{u}^{(1)} \cdot \mathbf{u}^{(2)}.$$

Partea stângă a acestei egalități este egală cu zero, ca urmare a simetricității tensorului \mathbf{S} , deci din faptul că valorile proprii sunt diferite ($S_{(1)} - S_{(2)} \neq 0$) rezultă direct ortogonalitatea vectorilor $\mathbf{u}^{(1)}$ și $\mathbf{u}^{(2)}$.

Dacă toate valorile proprii ale tensorului \mathbf{S} sunt diferite, vectorii săi proprii, $\mathbf{u}^{(k)}$, sunt ortogonali, putând fi astfel utilizați drept bază ortonormată. În această bază tensorul capătă o formă deosebit de simplă

$$\mathbf{S} = S_{(1)} \mathbf{u}^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + S_{(2)} \mathbf{u}^{(2)} \mathbf{u}^{(2)} + S_{(3)} \mathbf{u}^{(3)} \mathbf{u}^{(3)}, \quad (19.7)$$

iar matricea lui, formă diagonală

$$\|S_{ij}\| = \begin{vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{vmatrix}. \quad (19.8)$$

Cînd două valori proprii coincid (să zicem $S_{(1)} = S_{(2)} \neq S_{(3)}$), lor le corespunde un întreg plan de vectori proprii, perpendicular pe vectorul propriu $\mathbf{u}^{(3)}$. Într-adevăr, din (19.6) rezultă că în orice sistem de coordonate cartezian, pentru care drept versor \mathbf{e}_3 este luat vectorul propriu $\mathbf{u}^{(3)}$, tensorul \mathbf{S} capătă forma

$$\begin{vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{vmatrix}, \quad (19.9)$$

ceea ce și arată că într-adevăr orice vector perpendicular pe $\mathbf{u}^{(3)}$ este un vector propriu al tensorului \mathbf{S} , corespunzând valorii proprii $S_{(1)}$. Astfel de tensori este convenabil să fie scriși sub forma

$$\mathbf{S} = S_{\perp} \mathbf{I} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) \mathbf{k} \mathbf{k}, \quad S_{ij} = S_{\perp} \delta_{ij} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) k_i k_j, \quad (19.10)$$

în care \mathbf{k} este vectorul propriu unic (izolat), S_{\parallel} este valoarea proprie corespunzătoare lui, iar S_{\perp} valoarea proprie corespunzătoare planului vectorilor proprii.

În sfârșit, cînd toate trei valorile proprii coincid ($S_{(1)} = S_{(2)} = S_{(3)}$), tensorul este egal cu

$$\mathbf{S} = S \mathbf{I}, \quad S_{ij} = S \delta_{ij}; \quad (19.11)$$

pentru acest tensor, orice vector este un vector propriu.

Să examinăm pe cîteva exemple simple cum se determină practic valorile proprii și vectorii proprii ai unui tensor simetric de rangul doi.

Exemplul 1. În baza \mathbf{e}_k tensorul S_{ij} este de forma

$$\|S_{ij}\| = \begin{vmatrix} 11 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 7 \end{vmatrix}.$$

Vom calcula valorile lui proprii, rezolvînd în acest scop ecuația

$$\begin{vmatrix} 11 - S & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 9 - S & 0 \\ 0 & 0 & 7 - S \end{vmatrix} = 0$$

adică

$$(S^2 - 20S + 96)(7 - S) = 0.$$

De aici

$$S_{(1)} = 12, \quad S_{(2)} = 8, \quad S_{(3)} = 7.$$

Determinăm vectorul propriu $\mathbf{u}^{(1)}$, care corespunde valorii proprii $S_{(1)} = 12$, din sistemul de ecuații liniare

$$-u_1^{(1)} + \sqrt{3} u_2^{(1)} = 0,$$

$$\begin{aligned} \sqrt{3} u_1^{(1)} - 3u_2 &= 0, \\ -5u_3^{(1)} &= 0. \end{aligned}$$



Aici numai două ecuații sînt independente, deoarece ecuația a doua este egală cu prima înmulțită cu -3 . Din acest sistem găsim deci, că

$$u_3^{(1)} = 0, \quad u_1^{(1)} = \sqrt{3} u_2^{(1)}.$$

Rezultă că primul vector propriu este în fond determinat de

$$\mathbf{u}^{(1)} = (\sqrt{3} \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) u_2^{(1)}.$$

Impunînd condiția ca

$$\mathbf{u}^{(1)} \cdot \mathbf{u}^{(1)} = 1,$$

obținem $u_2^{(1)} = \pm 1/2$, iar în final avem

$$\mathbf{u}^{(1)} = \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{e}_2 \right).$$

Vectorul propriu $\mathbf{u}^{(2)}$ este găsit din sistemul de ecuații

$$3u_1^{(2)} + \sqrt{3} u_2^{(2)} = 0,$$

$$\sqrt{3} u_1^{(2)} + u_2^{(2)} = 0,$$

$$-u_3^{(2)} = 0.$$

El este egal cu

$$\mathbf{u}^{(2)} = \pm \left(\frac{1}{2} \mathbf{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_2 \right).$$

În fine, pentru vectorul propriu $\mathbf{u}^{(3)}$, obținem sistemul de ecuații

$$4 u_1^{(3)} + \sqrt{3} u_2^{(3)} = 0,$$

$$\sqrt{3} u_1^{(3)} + 2 u_2^{(3)} = 0,$$

$$0 u_3^{(3)} = 0.$$

Primele două ecuații formează un sistem de două ecuații liniare omogene cu două necunoscute. Determinantul său este egal cu 5. De aceea, el are numai soluția banală, $u_1^{(3)} = u_2^{(3)} = 0$. Componenta $u_3^{(3)}$ poate avea orice valoare, însă din condiția $\mathbf{u}^{(3)} \cdot \mathbf{u}^{(3)} = 1$, rezultă că $u_3^{(3)} = 1$. Deci,

$$\mathbf{u}^{(3)} = \pm \mathbf{e}_3.$$

Acum putem scrie tensorul S sub forma

$$S = 12 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{e}_2 \right) \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{e}_2 \right) + \\ + 8 \left(\frac{1}{2} \mathbf{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_2 \right) \left(\frac{1}{2} \mathbf{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{e}_2 \right) + 7 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3.$$

Exemplul 2. Să reducem la axele principale tensorul

$$S = 4(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 - (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1).$$

Pentru determinarea valorilor proprii avem ecuația

$$\begin{vmatrix} 4-S & -1 & 0 \\ -1 & 4-S & 0 \\ 0 & 0 & 3-S \end{vmatrix} = 0.$$

Rezolvînd-o, găsim

$$S_{(1)} = 5, S_{(2)} = 3, S_{(3)} = 3.$$

În acest caz este suficient să se determine numai un singur vector propriu, \mathbf{k} , care corespunde lui $S_{(1)} = 5$. Îl vom afla din sistemul de ecuații

$$-k_1 - k_2 = 0,$$

$$-k_1 - k_2 = 0,$$

$$-2k_3 = 0.$$

De aici,

$$\mathbf{k} = \pm \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_2 \right),$$

iar tensorul S se scrie sub forma (19.10),

$$S = 3\mathbf{I} + 2 \frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}}.$$

În cazul general, pentru calcularea valorilor proprii ale unui tensor, S_{ij} , trebuie să-l descompunem în partea sferică, $1/3 S_{kk} \delta_{ij}$, și în deviatorul $D_{ij} = S_{ij} - 1/3 S_{kk} \delta_{ij}$. În continuare se calculează cei doi invarianti ai deviatorului: parametrul de scară

$$0 = \sqrt{-\frac{1}{6} \delta_{ikm} \delta_{ilm} D_{ij} D_{kl}} = \sqrt{\frac{1}{6} D_{ij} D_{ij}} \quad (19.12)$$

și unghiul ψ , cuprins în limitele $(-\pi/6, \pi/6)$ și care este definit de condiția

$$\sin 3\psi = -\frac{\det \mathbf{D}}{2\theta^3}. \quad (19.13)$$

Valorile proprii, $D_{(i)}$, ale deviatorului \mathbf{D} (ele se numără în ordine crescătoare) se exprimă prin acești invarianți astfel

$$\begin{aligned} D_{(1)} &= -20 \sin(\pi/3 + \psi), \\ D_{(2)} &= 20 \sin \psi, \\ D_{(3)} &= 20 \sin(\pi/3 - \psi). \end{aligned} \quad (19.14)$$

Aceasta se poate verifica ușor, înlocuind oricare dintre valori în ecuația caracteristică a deviatorului. Valorile proprii ale tensorului \mathbf{S} sînt egale cu

$$S_{(i)} = D_{(i)} + \frac{1}{3} S_{kk}. \quad (19.15)$$

§ 20. MICILE VARIAȚII ALE TENSORULUI SIMETRIC DE RANGUL DOI

Rezolvarea multor probleme ale fizicii cristalelor este legată de următoarea problemă de algebră tensorială: se cunosc valorile proprii $S_{(i)}$ și vectorii proprii \mathbf{u}_i (în calculele ce urmează este mai comod să notăm vectorii proprii cu \mathbf{u}_i și nu cu $\mathbf{u}^{(i)}$, ca în paragrafele precedente) ale unui tensor simetric de rangul doi, \mathbf{S} . Cum vor varia ele în cazul unei variații mici, date, a tensorului \mathbf{S} ?

Vom considera mai întâi cazul în care toate cele trei valori proprii ale tensorului inițial, \mathbf{S} , sînt diferite. Adăugăm tensorului \mathbf{S} un mic tensor simetric $\boldsymbol{\zeta}$; dacă el este într-adevăr mic față de \mathbf{S} , atunci tensorul $\mathbf{S} + \boldsymbol{\zeta}$ trebuie să se deosebească puțin de tensorul \mathbf{S} . Deosebirile se vor manifesta, în primul rînd, prin mici modificări ale valorilor proprii, iar în al doilea rînd, printr-o mică rotire a tripletului de vectori proprii. Pentru ca variațiile $\xi_{(i)}$ ale valorilor proprii să fie mici, toate componentele tensorului $\boldsymbol{\zeta}$ trebuie să fie cu mult mai mici, în valoarea absolută, decît valorile proprii ale tensorului \mathbf{S}

$$|\zeta_{kl}| \ll |S_{(i)}|.$$

Iar pentru ca și rotația tripletului de vectori proprii să fie mică, componentele tensorului $\boldsymbol{\zeta}$ trebuie să fie cu mult mai mici, în valoare absolută, decît diferențele dintre valorile proprii ale tensorului

$$|\zeta_{kl}| \ll |S_{(i)} - S_{(j)}|.$$

Noile valori proprii modificate, $S_{(i)} + \xi_{(i)}$, și noii vectori proprii modificați $\mathbf{u}_i + \delta\mathbf{u}_i$, satisfac ecuația

$$(\mathbf{S} + \boldsymbol{\zeta}) \cdot (\mathbf{u}_i + \delta\mathbf{u}_i) = (S_{(i)} + \xi_{(i)})(\mathbf{u}_i + \delta\mathbf{u}_i). \quad (20.1)$$

Fără a micșora generalitatea, se pot considera vectorii \mathbf{u}_i unitari. Vom impune condiția ca și vectorii $\mathbf{u}_i + \delta\mathbf{u}_i$ modificați să fie tot unitari; pe lângă aceasta, așa cum știm, ei trebuie să fie ortogonali între ei

$$(\mathbf{u}_i + \delta\mathbf{u}_i) \cdot (\mathbf{u}_j + \delta\mathbf{u}_j) = \delta_{ij}.$$

Desfăcînd parantezele, obținem

$$u_i \cdot \delta u_j + u_j \cdot \delta u_i + \delta u_i \cdot \delta u_j = 0. \quad (20.2)$$

Să descompunem vectorii δu_i după baza u_1, u_2, u_3

$$\delta u_i = \omega_{ik} u_k. \quad (20.3)$$

Coefficienții acestei dezvoltări sînt

$$\omega_{ij} = \delta u_i \cdot u_j. \quad (20.4)$$

Din egalitatea (20.2), dacă se neglijează termenii mai mici ca două ordine de mărime, rezultă antisimetricitatea tensorului

$$\omega_{ji} + \omega_{ij} = 0. \quad (20.5)$$

Iar de aici, rezultă, la rîndul său, că creșterea δu_i a fiecărui vector propriu, u_i , este perpendiculară la acest vector. Într-adevăr, conform formulei (20.4) produsul scalar dintre vectorul propriu și creșterea sa este egal cu una dintre componentele diagonale ale tensorului ω , toate aceste componente, în virtutea egalității (20.5), fiind egale cu zero.

Să desfacem acum parantezele în formula (20.1), punînd, pentru a fixa ideile $u_i = u_1$ și, respectiv, $S_{(i)} = S_{(1)}$

$$S \cdot u_1 + S \cdot \delta u_1 + \zeta \cdot u_1 = S_{(1)} u_1 + S_{(1)} \delta u_1 + \xi_{(1)} u_{(1)}.$$

Aici am eliminat, de la bun început, termenii mai mici cu două ordine de mărime. Avînd în vedere că

$$S \cdot u_1 = S_{(1)} u_1 \quad (20.6)$$

și utilizînd dezvoltarea (20.4), să transcriem (20.6) sub forma

$$\omega_{12} S \cdot u_2 + \omega_{13} S \cdot u_3 + \zeta \cdot u_1 = \omega_{12} S_{(1)} u_2 + \omega_{13} S_{(1)} u_3 + \xi_{(1)} u_1.$$

Dar

$$S \cdot u_2 = S_{(2)} u_2,$$

iar

$$S \cdot u_3 = S_{(3)} u_3.$$

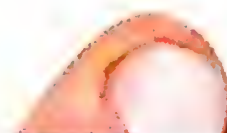
Deci

$$\zeta \cdot u_1 = \xi_{(1)} u_1 + \omega_{12} (S_{(1)} - S_{(2)}) u_2 + \omega_{13} (S_{(1)} - S_{(3)}) u_3. \quad (20.7)$$

Înmulțind scalar ambele părți ale egalității (20.7) succesiv cu u_1, u_2 și u_3 , vom obține rezultatele căutate

$$\xi_{(1)} = u_1 \cdot \zeta \cdot u_1, \quad \omega_{12} = \frac{u_2 \cdot \zeta \cdot u_1}{S_{(1)} - S_{(2)}}, \quad \omega_{13} = \frac{u_3 \cdot \zeta \cdot u_1}{S_{(1)} - S_{(3)}}. \quad (20.8)$$

Celelalte valori și componente proprii ale tensorului se calculează analog.



Dacă tensorul ζ este definit prin componentele sale ζ_{ij} în sistemul axelor principale ale tensorului S , atunci soluția problemei puse se scrie sub forma

$$\begin{aligned}\xi_{(1)} &= \zeta_{11}, & \omega_{23} &= -\omega_{32} = \frac{\zeta_{23}}{S_{(2)} - S_{(3)}}, \\ \xi_{(2)} &= \zeta_{22}, & \omega_{31} &= -\omega_{13} = \frac{\zeta_{31}}{S_{(3)} - S_{(1)}}, \\ \xi_{(3)} &= \zeta_{33}, & \omega_{12} &= -\omega_{21} = \frac{\zeta_{12}}{S_{(1)} - S_{(2)}}.\end{aligned}\quad (20.9)$$

Tensorul antisimetric ω definește rotația mică a tripletului vectorilor proprii. Pentru ca această rotație să fie într-adevăr mică, trebuie ca toate componentele tensorului ω să fie mult mai mici ca unitatea, pentru aceasta fiind necesar, așa cum se vede din formulele (20.9), ca componentele tensorului ω să fie, la rândul lor mici, nu numai în comparație cu valorile proprii ale tensorului S , ci și în comparație cu diferențele dintre ele.

Să trecem acum la examinarea celui alt caz: tensorul S are două valori proprii care coincid (S_{\perp}), iar cea de a treia este diferită de primele două ($S_{||}$). În acest caz, problema se complică considerabil. Tensorul S are acum un singur vector propriu u , care corespunde valorii proprii $S_{||}$, și un întreg plan propriu, care corespunde valorii dublu proprii, S_{\perp} . Tensorul modificat, $S + \zeta$, are însă în general vorbind, trei vectori proprii; unul dintre ei, $v = u + \delta u$, este vecin cu u , ceilalți doi aflându-se undeva în planul perpendicular pe acesta.

Fie q_1 , q_2 și v vectorii proprii unitari ai tensorului $S + \zeta$, iar p_1 și p_2 , proiecțiile vectorilor q_1 și q_2 pe planul propriu al tensorului S ; se poate scrie

$$q_1 = p_1 + \omega_{13}u, \quad q_2 = p_2 + \omega_{23}u, \quad v = \omega_{31}p_1 + \omega_{32}p_2 + u. \quad (20.10)$$

Din faptul că tripletul vectorilor proprii este ortonormat, rezultă că (în limitele preciziei considerate) vectorii p_1 și p_2 sunt unitari și perpendiculari între ei, iar tensorul ω este antisimetric.

În ecuațiile pentru valorile proprii și pentru vectorii proprii

$$\begin{aligned}(S + \zeta) \cdot q_1 &= (S_{\perp} + \xi_{(1)})q_1, \\ (S + \zeta) \cdot q_2 &= (S_{\perp} + \xi_{(2)})q_2, \\ (S + \zeta) \cdot v &= (S_{||} + \xi_{(3)})v,\end{aligned}\quad (20.11)$$

înlocuim expresia vectorilor proprii (20.10) și efectuăm produsul scalar termen cu termen, neglijând termenii mai mici cu două ordine de mărime. După reducerea termenilor asemenea, obținem

$$\begin{aligned}\zeta \cdot q_1 &= \xi_{(1)}p_1 + (S_{||} - S_{\perp})\omega_{31}u, \\ \zeta \cdot p_2 &= \xi_{(2)}p_2 + (S_{||} - S_{\perp})\omega_{32}u, \\ \zeta \cdot u &= (S_{||} - S_{\perp})(\omega_{31}p_1 + \omega_{32}p_2) + \xi_{(3)}u.\end{aligned}\quad (20.12)$$

Înmulțind scalar egalitatea vectorială (20.12) succesiv cu p_1 , p_2 și u , ajungem la șase relații

$$u \cdot \zeta \cdot u = \xi_{(3)}; \quad (20.13)$$

$$p_1 \cdot \zeta \cdot p_1 = \xi_{(1)}, \quad p_2 \cdot \zeta \cdot p_2 = \xi_{(2)}, \quad p_1 \cdot \zeta \cdot p_2 = 0; \quad (20.14)$$

$$u \cdot \zeta \cdot p_1 = (S_{||} - S_{\perp})\omega_{31}, \quad u \cdot \zeta \cdot p_2 = (S_{||} - S_{\perp})\omega_{32}, \quad (20.15)$$

pe care, pentru comoditate, le-am aranjat în trei grupuri.

Relația (20.13) este formula care permite calcularea directă a lui $\xi_{(3)}$.

Vectorii p_1 și p_2 ne sînt deocamdată necunoscuți, însă relațiile (20.14) arată că sînt vectorii proprii ai unui tensor bidimensional ζ_{\perp} — proiecțiile tensorului ζ pe planul propriu al tensorului S . În mod corespunzător, $\xi_{(1)}$ și $\xi_{(2)}$ sînt valorile proprii ale acestui tensor bidimensional.

Fie un tensor ζ , dat prin matricea componentelor sale $|\zeta_{ij}|$ într-un sistem de coordonate construit pe versorii e_1, e_2, u , unde e_1 , și e_2 sînt doi vectori arbitrari, perpendiculari între ei, din planul propriu al tensorului S . Atunci tensorul bidimensional ζ_{\perp} în sistemul de coordonate construit pe versorii e_1 și e_2 este dat prin matricea componentelor

$$\| \zeta_{ij}^{\perp} \| = \begin{vmatrix} \zeta_{11} & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} \end{vmatrix}$$

Valorile sale proprii $\xi_{(1)}$ și $\xi_{(2)}$ sînt rădăcini ale ecuației de gradul doi

$$\begin{vmatrix} \zeta_{11} - \xi & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} - \xi \end{vmatrix} = 0. \quad (20.16)$$

Ele sînt egale cu

$$\xi_{(1,2)} = \frac{1}{2} [(\zeta_{11} + \zeta_{22}) \pm \sqrt{(\zeta_{11} - \zeta_{22})^2 + (2\zeta_{12})^2}]. \quad (20.17)$$

Acum putem găsi ușor și vectorii proprii ai tensorului ζ_{\perp}

$$p_1 = \frac{\zeta_{12}e_1 + (\xi_{(1)} - \zeta_{11})e_2}{\sqrt{(\xi_{(1)} - \zeta_{11})^2 + \zeta_{12}^2}}, \quad p_2 = \frac{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})e_1 + \zeta_{12}e_2}{\sqrt{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})^2 + \zeta_{12}^2}}. \quad (20.18)$$

Astfel, relațiile (20.14) sînt folosite integral.

Cunoscînd vectorii p_1 și p_2 , se pot acum găsi, din relația (20.15), coeficienții ω_{31} și ω_{32} . Evident

$$\omega_{31} = \frac{\zeta_{12}\zeta_{31} + \zeta_{23}(\xi_{(1)} - \zeta_{11})}{\sqrt{(S_{||} - S_{\perp})(\xi_{(1)} - \zeta_{11})^2 + \zeta_{12}^2}},$$

$$\omega_{32} = \frac{\zeta_{12}\zeta_{23} + \zeta_{31}(\xi_{(2)} - \zeta_{22})}{(S_{||} - S_{\perp})\sqrt{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})^2 + \zeta_{12}^2}}. \quad (20.19)$$

După aceasta, cu ajutorul formulelor (20.10) se pot determina în fine, vectorii proprii q_1, q_2 și v ai tensorului $S + \zeta$. Problema este complet rezolvată.

Cazul în care toate valorile proprii ale tensorului S coincid este, evident, inutil să fie studiat. Vectorii proprii ai tensorului $S + \zeta$ coincid în acest caz cu vectorii proprii ai tensorului ζ , iar corecțiile corespunzătoare la valorile proprii sînt egale cu valorile proprii ale tensorului ζ .

§ 21. COMPONENTE NORMALE ȘI COMPONENTE TANGENȚIALE ALE UNUI TENSOR SIMETRIC DE RANGUL DOI

Se numește *componentă normală* a unui tensor simetric de rangul doi, S , după direcția vectorului unitar n , numărul egal cu

$$n \cdot S \cdot n = S_{ij} n_i n_j. \quad (21.1)$$

Dacă vectorul unitar n se ia drept unul dintre vectorii sistemului de coordonate nou, X_1', X_2', X_3' (de pildă $n = e_1$), atunci componenta normală va fi pur și simplu componenta diagonală, corespunzătoare tensorului în sistemul X_1', X_2', X_3' ; în exemplul considerat,

$$n \cdot S \cdot n = S_{1'1'}. \quad (21.2)$$

În sistemul de coordonate construit pe axele principale ale tensorului, formulele pentru calcularea componentei sale normale capătă o formă deosebit de simplă. Considerînd că n_i sînt componentele vectorului unitar n după sistemul de coordonate propriu al tensorului S , obținem

$$n \cdot S \cdot n = S_{(1)} n_1^2 + S_{(2)} n_2^2 + S_{(3)} n_3^2. \quad (21.3)$$

Dacă, în particular, două dintre valorile proprii ale tensorului S coincid, atunci componenta lui normală depinde numai de componenta $n_3 = n \cdot k$

$$n \cdot S \cdot n = S_{\perp}(1 - n_3^2) + S_{\parallel} n_3^2 = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp})n_3^2.$$

În sfîrșit, cînd toate cele trei valori proprii ale tensorului coincid, componenta normală este $n \cdot S \cdot n = S$.

Cunoscînd cele șase componente normale ale tensorului simetric de rangul doi, S , se pot calcula, în general, toate celelalte componente ale tensorului. Ele se determină ca soluție a sistemului de șase ecuații liniare cu șase necunoscute

$$n_i^{(\mu)} n_j^{(\mu)} S_{ij} = \alpha_{(\mu)} \quad (\mu = 1, \dots, 6), \quad (21.4)$$

cu factorul λ deocamdată nedeterminat și se determină extremul ei absolut prin procedeul obișnuit, adică se anulează derivatele sale parțiale

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = 0, \quad (21.10)$$

iar apoi, din ecuațiile (21.10) și (21.8) se găsesc componentele n_i și factorul λ . Ecuațiile (21.10) capătă, în cazul nostru, forma

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda \frac{\partial f}{\partial n_i} = S_{ij} n_j + S_{ji} n_j - 2\lambda n_i = 0,$$

adică (ținând cont de faptul că tensorul S este simetric)

$$S_{ij} n_j = \lambda n_i, \quad S \cdot n = \lambda n, \quad (21.11)$$

dar aceasta nu este altceva decît tocmă condiția ca n să fie unul dintre vectorii proprii ai tensorului S , iar λ , valoarea proprie corespunzătoare acestui vector.

Astfel, componenta normală a unui tensor își atinge valorile extreme în direcțiile vectorilor proprii ale acestui tensor. Mai mult chiar, aceste valori extreme sînt egale cu valorile proprii corespunzătoare tensorului, dat fiind că din (21.11) și (21.8) rezultă

$$n \cdot S \cdot n = S_{ij} n_i n_j = \lambda n_i n_i = \lambda. \quad (21.12)$$

Din cele demonstrate mai rezultă și că dacă toate valorile proprii ale unui tensor sînt pozitive (negative), atunci și toate componentele lui normale au această proprietate. Dacă printre valorile proprii ale tensorului există și valori proprii pozitive și valori proprii negative, componenta normală a tensorului ia, de asemenea, atît valori pozitive cît și valori negative. Fiind o funcție continuă de direcție, rezultă că, pentru un anumit con al direcțiilor, ea trebuie să fie egală cu zero.

Să trecem la examinarea componentelor tangențiale ale unui tensor simetric de rangul doi. Fie S un tensor simetric de rangul doi, iar p și q vectori unitari reciproc perpendiculari

$$p \cdot p = 1, \quad q \cdot q = 1, \quad p \cdot q = 0. \quad (21.13)$$

Se numește *componentă tangențială* a tensorului S după direcțiile p și q numărul

$$p \cdot S \cdot q = S_{ij} p_i q_j. \quad (21.14)$$

Deoarece tensorul S este simetric, direcțiile p și q din această definiție sînt echivalente și intersanjabile. Folosind faptul că vectorii unitari p și q sînt reciproc perpendiculari, se poate construi pe aceștia, luați ca versori, un nou sistem de coordonate X_1, X_2, X_3 .

$$e_1' = p, e_2' = q, e_3' = p \times q.$$

În noul sistem, componenta tangențială va fi

$$p \cdot S \cdot q = S_{1'2'} \quad (21.15)$$

În timp ce componentele maxime corespund componentelor diagonale ale tensorului, cele tangențiale corespund componentelor nediagonale.

În sistemul de coordonate propriu, componentele tangențiale se exprimă prin următoarele formule: în cazul general

$$p \cdot S \cdot q = S_{(1)} p_1 q_1 + S_{(2)} p_2 q_2 + S_{(3)} p_3 q_3, \quad (21.16)$$

cînd două valori proprii coincid

$$p \cdot S \cdot q = (S_{\parallel} - S_{\perp}) p_3 q_3, \quad (21.17)$$

și, în sfîrșit, în cazul cînd cele trei valori proprii coincid

$$p \cdot S \cdot q = 0. \quad (21.18)$$

Deoarece componentele tangențiale ale unui tensor sferic sînt egale cu zero, este clar că componentele tangențiale ale oricărui tensor coincid cu componentele tangențiale ale deviatorului lui. De aici rezultă că avînd setul de componente tangențiale, nu se poate reconstitui întregul tensor, ci în cel mai bun caz, numai deviatorul său. Pentru aceasta sînt suficiente cele cinci componente tangențiale.

Pentru componentele tangențiale, problema de extremum se complică substanțial față de aceeași problemă pentru componentele normale, însă se rezolvă prin aceeași metodă. Se cere să se determine valorile p_i și q_i pentru care forma biliniară atinge extremul

$$F(p, q) = S_{ij} p_i q_j \quad (21.19)$$

și care să satisfacă condițiile suplimentare

$$\varphi(p) = p_i p_i - 1 = 0, \quad \varphi(q) = q_i q_i - 1 = 0, \quad \psi(p, q) = p_i q_i = 0. \quad (21.20)$$

Să luăm funcția

$$\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - \frac{1}{2} \lambda' \varphi(\mathbf{p}) - \frac{1}{2} \lambda'' \varphi(\mathbf{q}) - \mu \psi(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (21.21)$$

în care λ' , λ'' și μ sunt multiplicatori Lagrange nedeterminați, iar din ecuațiile

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p_i} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial q_i} = 0 \quad (21.22)$$

și (21.20) determinăm alți vectorii ce ne interesează, \mathbf{p} și \mathbf{q} , cit și valorile multiplicatorilor Lagrange. Ținând seama totodată de faptul că tensorul \mathbf{S} este simetric, ecuațiile (21.22) dau

$$S_{ij} q_j - \lambda' p_i - \mu q_i = 0,$$

$$S_{ij} p_j - \lambda'' q_i - \mu p_i = 0. \quad (21.23)$$

Scrise sub formă vectorială, aceste șase ecuații se reduc la două

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{q} - \lambda' \mathbf{p} - \mu \mathbf{q} = 0, \quad (21.24)$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{p} - \lambda'' \mathbf{q} - \mu \mathbf{p} = 0.$$

Înmulțind scalar prima dintre ele cu \mathbf{q} , iar pe a doua cu \mathbf{p} , găsim

$$\mu = \mathbf{q} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}; \quad (21.25)$$

și viceversa, înmulțind scalar prima ecuație (21.24) cu \mathbf{p} , iar pe a doua cu \mathbf{q} găsim

$$\lambda' = \lambda'' = \mathbf{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q}; \quad (21.26)$$

notăm această mărime, pur și simplu, cu λ . Utilizând această notație vom aduna una cu alta și vom scădea una din alta ecuațiile vectoriale (21.24); pentru a avea de-a face, ca și până acum, cu vectori unitari, mai împărțim încă suma și diferența lor la $\sqrt{2}$. În final ajungem la ecuațiile vectoriale

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{q} + \mathbf{p}}{\sqrt{2}} - (\mu + \lambda) \frac{\mathbf{q} + \mathbf{p}}{\sqrt{2}} &= 0, \\ \mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{q} - \mathbf{p}}{\sqrt{2}} - (\mu - \lambda) \frac{\mathbf{q} - \mathbf{p}}{\sqrt{2}} &= 0, \end{aligned} \quad (21.27)$$

care arată că $(\mathbf{q} + \mathbf{p})/\sqrt{2}$ și $(\mathbf{q} - \mathbf{p})/\sqrt{2}$ sunt vectorii proprii ai tensorului \mathbf{S} , iar $\mu + \lambda$ și $\mu - \lambda$ sunt valorile lor proprii respective.

Fie, de pildă

$$\frac{\mathbf{q} + \mathbf{p}}{\sqrt{2}} = \mathbf{u}^{(1)}, \quad \frac{\mathbf{q} - \mathbf{p}}{\sqrt{2}} = \mathbf{u}^{(2)},$$

atunci

$$\mu + \lambda = S_{(1)}, \quad \mu - \lambda = S_{(2)}$$

De aici obținem

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{u}^{(1)} + \mathbf{u}^{(2)}}{\sqrt{2}}, \quad \mathbf{p} = \frac{\mathbf{u}^{(1)} - \mathbf{u}^{(2)}}{\sqrt{2}},$$

$$\lambda = \frac{S_{(1)} - S_{(2)}}{2}, \quad \mu = \frac{S_{(1)} + S_{(2)}}{2};$$

schimbând rolurile vectorilor $\mathbf{u}^{(1)}$ și $\mathbf{u}^{(2)}$, am fi obținut

$$\lambda = \frac{S_{(2)} - S_{(1)}}{2}.$$

Evident, maximul funcției

$$F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q} = S_{ij} p_i q_j$$

este egal cu semidiferența dintre cea mai mare și cea mai mică valoare proprie a tensorului \mathbf{S} , minimul fiind egal cu aceeași semidiferență cu semnul schimbat. Direcțiile \mathbf{p} și \mathbf{q} , după care funcția F atinge valorile extreme, sînt bisectoarele unghiurilor dintre vectorii proprii ce corespund celei mai mari și, respectiv celei mai mici valori proprii.

§ 22. SIMETRIA EXTERIOARĂ ȘI REPREZENTAREA VECTORILOR ȘI TENSORILOR DE RANGUL DOI

Dacă într-o transformare oarecare de coordonate toate componentele unui tensor rămîn neschimbate, se spune că tensorul este *invariant* față de acea transformare. Mulțimea transformărilor ortogonale față de care un tensor dat este invariant constituie *grupul simetriei lui exterioare*. Vom analiza simetria exterioară a vectorilor și a tensorilor simetrici de rangul doi (Șubnikov, 1949)-

Însăși reprezentarea unui vector sub formă de săgeată sugerează că grupul lui de simetrie este grupul limită Curie, ∞m -axa de simetrie coîncizînd cu direcția vectorului. Pentru a demonstra aceasta, să alegem sistemul de coordonate vechi, astfel încît axa X_3 să fie orientată după vectorul nostru, \mathbf{v} . Aceasta înseamnă că

$$v_1 = v_2 = 0, \quad v_3 = v \quad \text{sau} \quad v_k = v \delta_{k3}.$$

Prin urmare în orice sistem de coordonate nou componentele vectorului \mathbf{v} vor fi egale cu $v_{i'} = c_{i'3} v$. Pentru ca și în sistemul nou să fie valabilă egalitatea $v_{i'} = v \delta_{i'3}$ este necesar ca $c_{i'3} = \delta_{i'3}$. Se poate arăta, fără dificultate, că toate matricele ortogonale, care satisfac această condiție pot fi reprezentate în una dintre următoarele două forme

$$\left\| \begin{array}{ccc} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, \quad (22.1)$$

$$0 \leq \varphi < 2\pi,$$

$$0 \leq \psi < \pi.$$

Tabelul 17.1 arată că acestea sînt matrice ale grupului ∞m , iar axa ∞ coincide cu X_3 , adică cu vectorul \mathbf{v} .

În cadrul studiului simetriei unui tensor de rangul doi, este necesar să se distingă trei cazuri, corespunzător numărului de valori proprii ale tensorului respectiv, care coincid. Dacă toate cele trei valori proprii ale tensorului coincid, adică $\mathbf{S} = S\mathbf{I}$, atunci el este invariant față de orice transformări ortogonale. Grupul lui de simetrie este $\infty\infty m$, iar tensorul se numește tensor *izotrop* sau *sferic*.

În cazul în care coincid două valori proprii, tensorul \mathbf{S} este

$$\mathbf{S} = S_{\perp} \mathbf{I} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) \mathbf{k} \mathbf{k}.$$

Să alegem sistemul vechi de coordonate astfel încît axa X_3 să coincidă cu direcția \mathbf{k} . Deoarece primul termen al sumei este indiscutabil invariant față de orice transformări ortogonale, îl vom analiza numai pe al doilea. În sistemul vechi singura lui componentă, diferită de zero, era

$$S_{33}^{(2)} = S_{\parallel} - S_{\perp}.$$

Rezultă deci că în orice sistem de coordonate nou, componentele lui vor fi

$$S_{i'j'}^{(2)} = c_{i'3} c_{j'3} S_{33}^{(2)}.$$

Pentru ca în sistemul nou, componentele să fie aceleași ca în sistemul vechi, trebuie ca $c_{i'3} = \pm \delta_{i'3}$. Toate matricele ortogonale,

care satisfac această condiție, pot fi reprezentate, pentru $c_{i'3} = \delta_{i'3}$, într-una dintre formele (22.1), iar pentru $c_{i'3} = \delta_{i'3}$ în una dintre formele

$$\begin{aligned} & \left\| \begin{array}{ccc} -\cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, \left\| \begin{array}{ccc} \cos 2\psi & \sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & -\cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, (22.2) \\ & 0 \leq \varphi < 2\pi, \\ & 0 \leq \psi < 2\pi. \end{aligned}$$

După cum se vede din tabelul 17.1, matricele celor patru forme enumerate, (22.1) și (22.2), formează, în ansamblu, grupul $\infty/m\bar{m}$. Axa acestui grup este orientată după vectorul propriu k . Tensorii cu o astfel de simetrie se numesc tensori *transversal-izotropi*.

Când toate cele trei valori proprii ale tensorului sînt diferite, alegem drept sistem vechi, sistemul de coordonate propriu al lui. În acest sistem, sînt diferite de zero numai trei componente

$$S_{11} = S_{(1)}, S_{22} = S_{(2)} \text{ și } S_{33} = S_{(3)}.$$

Evident, în noul sistem de coordonate, toate componentele tensorului vor rămîne neschimbate, dacă matricea transformărilor ortogonale este de forma

$$c_{i'k} = \left\| \begin{array}{ccc} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\|. \quad (22.3)$$

Această condiție este satisfăcută de cele opt matrice ale grupului mmm . Axa 2 a acestui grup este orientată după vectorii proprii ai tensorului S .

Simetria exterioară a tensorilor și a vectorilor este ilustrată intuitiv în reprezentările lor grafice. Pentru reprezentarea grafică a tensorilor simetrici de rangul doi se utilizează suprafețe caracteristice și suprafețe indicatoare. Suprafața indicatoare* a unui tensor S este dată de ecuația

$$r(n) = n \cdot S \cdot n = S_{ij} n_i n_j, \quad (22.4)$$

care înseamnă că, de la originea axelor de coordonate se dispun în fiecare direcție n segmente egale numeric cu componenta normală a tensorului S în direcția respectivă; vîrfurile acestor seg-

* Suprafața caracteristică mai este numită caracteristică, iar pentru suprafața indicatoare se utilizează noțiunea simplă de suprafață.

mente constituie tocmai suprafața unui tensor. Deoarece deja cele șase componente normale ale tensorului simetric de rangul doi, alese în mod corespunzător, îl definesc complet, este evident că folosind suprafața tensorului, cu atât mai mult, se poate reconstitui întregul tensor.

Exprimind componentele vectorului unitar n în coordonate sferice (fig. 22.1)

$$n_1 = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_2 = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_3 = \cos \theta, \quad (22.5)$$

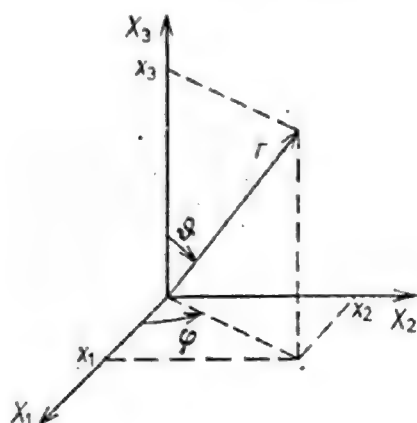


Fig. 22.1. Legătura dintre coordonatele sferice (r, θ, φ) și coordonatele carteziene (x_1, x_2, x_3) .

vom obține ecuația suprafeței în aceste coordonate. Cea mai simplă formă o va avea aceasta dacă vectorii de la care se consideră unghiurile θ și φ , se suprapun cu vectorii proprii ai tensorului. Dacă toate valorile proprii ale tensorului sînt diferite, atunci

$$r = (S_{(1)} \cos^2 \varphi + S_{(2)} \sin^2 \varphi) \sin^2 \theta + S_{(3)} \cos^2 \theta. \quad (22.6)$$

Dacă două valori proprii ale lui coincid, atunci

$$r = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) \cos^2 \theta; \quad (22.7)$$

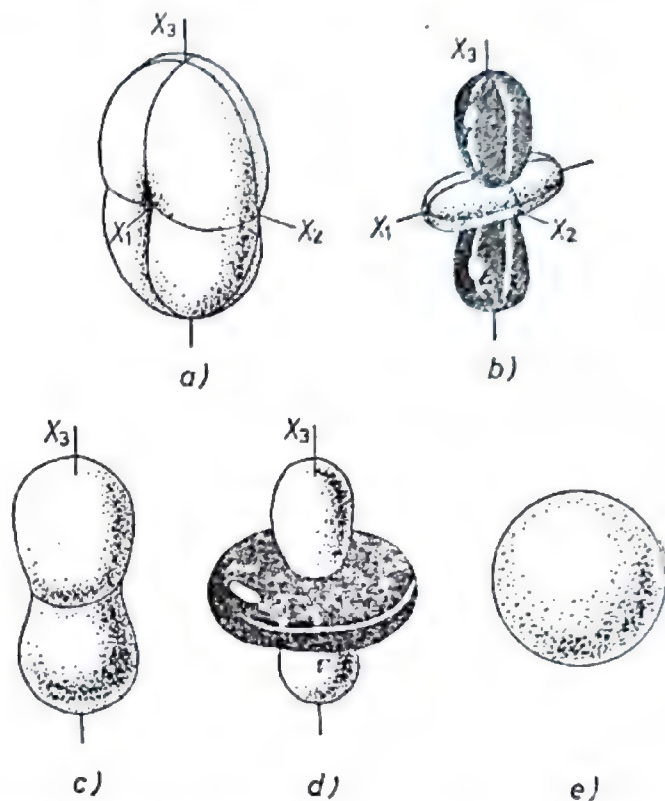
faptul că r nu depinde de unghiul φ înseamnă că acesta este o suprafață de rotație a cărei axă coincide cu vectorul propriu. În sfîrșit, pentru tensorul $S = SI$ suprafața este sfera $r = S$.

Dacă toate valorile proprii ale tensorului S sînt pozitive, atunci distanța r , de la originea sistemului de coordonate a oricărui punct al suprafeței este tot pozitivă. Dacă însă printre valorile proprii se întîlnesc valori negative, atunci, pentru unele dintre direcții, r va fi, de asemenea, negativ. Dat fiind că distanța dintre două puncte este o mărime nenegativă, rezultă că menținându-se în cadrul geometriei obișnuite, suprafața corespunzătoare este imposibil de construit. A. V. Șubnikov a propus ca, în acest caz, porțiunile suprafeței corespunzătoare valorilor negative ale lui r să fie construite la fel ca și porțiunile pozitive obișnuite ale

suprafeței, însă cele negative să fie colorate în negru, spre deosebire de cele pozitive, care rămân albe.

În figura 22.2 sînt reprezentate diferite tipuri de suprafețe ale tensorilor de rangul doi. Simetria acestor suprafețe coincide cu simetria exterioară a tensorilor pe care îi reprezintă.

Fig. 22.2. Suprafețele tensorilor simetrici de rangul doi, S . Tensorii simetrici mmm : a) pentru $S_{(3)} > S_{(2)} > S_{(1)}$, b) pentru $S_{(1)} > S_{(2)} > S_{(3)}$. Tensorii simetrici ∞/mm : c) pentru $S_{||} > S_{\perp} > 0$, d) pentru $S_{||} > 0 > S_{\perp}$. Tensorul simetrici $\infty/\infty m$, $S > 0$. Axele de coordonate sînt orientate după vectorii proprii.



Suprafața poate fi construită și pentru un vector. Componenta normală a unui vector v după direcția vectorului unitar n este normală să denumim numărul $v \cdot n$. Suprafața vectorului v se va defini prin ecuația

$$r(n) = v \cdot n = v_i n_i \quad (22.8)$$

dacă se suprapune direcția pozitivă a axei X_3 de la care se măsoară unghiul θ , cu vectorul v , (22.8) capătă forma

$$r = v \cos \theta. \quad (22.9)$$



Fig. 22.3. Suprafața unui vector: grupul de simetrie al suprafeței este ∞m , iar grupul de antisimetrie, (v. §68) $\infty/m'm$.

Această suprafață reprezintă două sfere tangente — una albă și una neagră (fig. 22.3), diametrul fiecăruia dintre ele fiind egal cu v . Grupul de simetrie al acestei figuri, ∞m , coincide, cum și era de așteptat, cu grupul de simetrie exterioară al vectorului.

Pentru reprezentarea unui tensor simetric de rangul doi, S , se folosește și *suprafața caracteristică**. Ecuația ei este

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{r} = 1, \quad S_{ij} x_i x_j = 1. \quad (22.10)$$

Într-un sistem de coordonate construit pe axele principale ale tensorului, ea capătă forma

$$S_{(1)} x_1^2 + S_{(2)} x_2^2 + S_{(3)} x_3^2 = 1 \quad (22.11)$$

și, în funcție de semnele valorilor proprii, descrie un elipsoid ($+++$), un hiperboloid cu o singură pînză ($++-$), un hiperboloid cu două pinze ($+- -$) sau un elipsoid imaginar ($---$).

Exprimînd raza vectoare \mathbf{r} sub forma $\mathbf{r} = r\mathbf{p}$, unde r este lungimea ei, iar \mathbf{p} , un vector unitar, găsim din ecuația (22.10) că

$$r = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}}. \quad (22.12)$$

Prin urmare, caracteristica se află în acele conuri în care sînt conținute părțile albe ale suprafeței, raza vectoare a caracteristicii fiind invers proporțională cu rădăcina pătrată din raza vectoare a suprafeței după aceeași direcție. În practică, caracteristicile se utilizează de obicei pentru reprezentarea tensorilor ale căror valori proprii sînt, toate, pozitive. Cel mai frecvent, ele se utilizează în optica cristalelor: indicatricea optică, elipsoidul lui Fresnel (v. § 35 și § 36).

Fiecare tensor simetric de rangul doi are *planuri izotrope*; secțiunile centrale date de caracteristica și suprafața tensorilor cu aceste planuri se numesc *axe de izotropie*. Evident, pentru un tensor izotrop orice secțiune centrală reprezintă un plan izotropic și orice direcție este o axă de izotropie. În cazul unui tensor transversal-izotrop planul izotropic este reprezentat de planul vectorilor proprii. Deoarece în cazul unui tensor transversal-izotrop există numai o singură axă de izotropie, el se mai numește și tensor *uniax* (F. I. Fiodorov, 1958, 1965).

Tensorul cu cele trei valori proprii diferite are două axe de izotropie; aceasta rezultă din faptul că pentru o suprafață de ordinul doi,

$$S_{(1)} x_1^2 + S_{(2)} x_2^2 + S_{(3)} x_3^2 = 1,$$

unde

$$S_{(1)} \neq S_{(2)} \neq S_{(3)},$$

* Vezi nota de la pagina 187.

există două secțiuni circulare. De aceea, astfel de tensori se numesc tensori biași (F. I. Fiodorov, 1958, 1965). Într-adevăr, din orice pereche de vectori unitari, \mathbf{c}' și \mathbf{c}'' , se pot constitui tensorii

$$\mathbf{S} = a\mathbf{I} + b(\mathbf{c}'\mathbf{c}'' + \mathbf{c}''\mathbf{c}'), \quad S_{ij} = a\delta_{ij} + b(c'_i c''_j + c''_i c'_j). \quad (22.13)$$

Toate componentele normale ale tensorului \mathbf{S} în direcțiile perpendiculare pe oricare dintre vectorii \mathbf{c}' și \mathbf{c}'' sînt egale între ele: atît pentru $\mathbf{n} \cdot \mathbf{c}' = 0$ cît și pentru $\mathbf{n} \cdot \mathbf{c}'' = 0$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = a\mathbf{n} \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{n} + b(\mathbf{n} \cdot \mathbf{c}'\mathbf{c}'' \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{c}''\mathbf{c}' \cdot \mathbf{n}) = a.$$

Aceasta înseamnă că planurile perpendiculare pe vectorii \mathbf{c}' și \mathbf{c}'' sînt planuri izotrope, vectorii înșiși fiind orientați după axele de izotropie \mathbf{c}' și \mathbf{c}'' . Se poate ușor verifica faptul că vectorii proprii (nenormați) și valorile proprii ale tensorului \mathbf{S} , care le corespund, sînt egale respectiv cu

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(1)} &= \mathbf{c}' - \mathbf{c}'', \quad S_{(1)} = a - b(1 - \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}''); \\ \mathbf{u}^{(2)} &= \mathbf{c}' \times \mathbf{c}'', \quad S_{(2)} = a; \\ \mathbf{u}^{(3)} &= \mathbf{c}' + \mathbf{c}'', \quad S_{(3)} = a + b(1 + \mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}''). \end{aligned} \quad (22.14)$$

Astfel, un vector propriu, care corespunde valorii proprii medie ca mărime, este perpendicular pe planul axelor de izotropie (adică orientat după linia de intersecție a planurilor de izotropie), ceilalți doi vectori proprii sînt orientați după bisectoarele unghiurilor dintre axele de izotropie. Vectorii unitari ai axelor de izotropie se pot exprima prin vectorii proprii unitari $\mathbf{u}^{(i)}$ și prin valorile proprii $S_{(1)} < S_{(2)} < S_{(3)}$ ale tensorului \mathbf{S}

$$\begin{aligned} \mathbf{c}' &= k_1 \mathbf{u}^{(1)} + k_3 \mathbf{u}^{(3)}, \quad \mathbf{c}'' = -k_1 \mathbf{u}^{(1)} + k_3 \mathbf{u}^{(3)}, \\ k_1 &= \sqrt{\frac{S_{(3)} - S_{(2)}}{S_{(3)} - S_{(1)}}}, \quad k_3 = \sqrt{\frac{S_{(2)} - S_{(1)}}{S_{(3)} - S_{(1)}}}. \end{aligned} \quad (22.15)$$

Axele de izotropie ale caracteristicilor, care se utilizează în fizica cristalelor — indicatricele optice și elipsoidul lui Fresnel — se numesc *axe optice*, de specia întâi și, respectiv, doi, sau *binormale* și *biradiale* (v. § 35, § 36). În general, reprezentarea tensorilor sub forma (22.13) se aplică în special în fizica cristalelor (F. I. Fiodorov, 1958).

§ 23. VECTORI AXIALI

Alături de vectorii cu ajutorul cărora se exprimă deplasarea, viteza, accelerația, forța și alte mărimi care se reprezintă foarte just printr-o săgeată, în fizică se utilizează și vectori de un complet alt tip, care exprimă rotația, viteza unghiulară, accelerația unghiulară, momentul forței, intensitatea și inducția cîmpului magnetic. Ei caracterizează o rotație în jurul unei anumite axe, fiind normal să-i prezentăm printr-un segment de dreaptă, orientat paralel cu axa, indicînd, în același timp, sensul de rotație în jurul axei (fig. 23.1). Astfel de vectori se numesc *vectori axiali*, pe cînd vectorii obișnuiți, pentru a sublinia diferența lor față de cei axiali, se mai numesc uneori *vectori polari*.

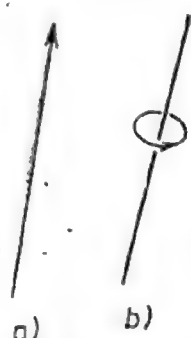
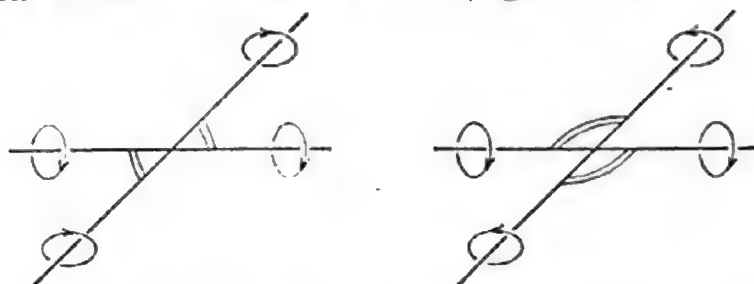


Fig. 23.1. Un vector polar (a) și un vector axial (b).

Vectorii axiali se deosebesc de cei polari prin grupul de simetrie. Grupul de simetrie al unui vector axial este ∞/m . Spre deosebire de grupul de simetrie al unui vector polar, ∞m , grupul de simetrie al unui vector axial este centrosimetric (are un centru de simetrie): un vector axial este invariant la inversie (precum și față de reflexia pe orice plan perpendicular pe el). Doi vectori axiali care se intersectează formează între ei două unghiuri suplimentare. Dacă un vector este rotit pînă se suprapune peste altul, atunci la rotirea cu unul dintre cele două unghiuri, după ce cei doi vectori se suprapun, sensurile de rotație coincid, iar prin rotirea cu celălalt unghi, sensurile de rotație vor fi contrare. Vom considera, prin urmare, că primul dintre aceste unghiuri reprezintă unghiul dintre vectorii axiali (fig. 23.2).

Fig. 23.2. Unghiul dintre doi vectori axiali.



Să examinăm algebra vectorilor axiali. Prin înmulțirea unui vector axial cu un număr pozitiv, λ , lungimea vectorului se mărește de λ ori, iar dacă λ este negativ, atunci sensul rotației se schimbă în sens invers față de cel inițial.

Suma a doi vectori axiali, \vec{a} și \vec{b} , se definește analog cu suma a doi vectori polari. Și aici se poate aplica oricare dintre cele două reguli echivalente: regula paralelogramului sau regula triunghiului. În primul caz, pe vectorii \vec{a} și \vec{b} se construiește un paralelogram;

vectorul $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b}$ este aceea diagonală a paralelogramului care secționează unghiul dintre vectorii \vec{a} și \vec{b} , iar sensul rotației se alege astfel, încît după rotirea vectorului \vec{c} în interiorul unghiului dintre vectorii \vec{a} și \vec{b} astfel încît să se suprapună cu unul dintre vectorii inițiali, sensurile de rotație în jurul axelor ce le reprezintă (pe care le vom numi circulație) să coincidă (fig. 23.3).

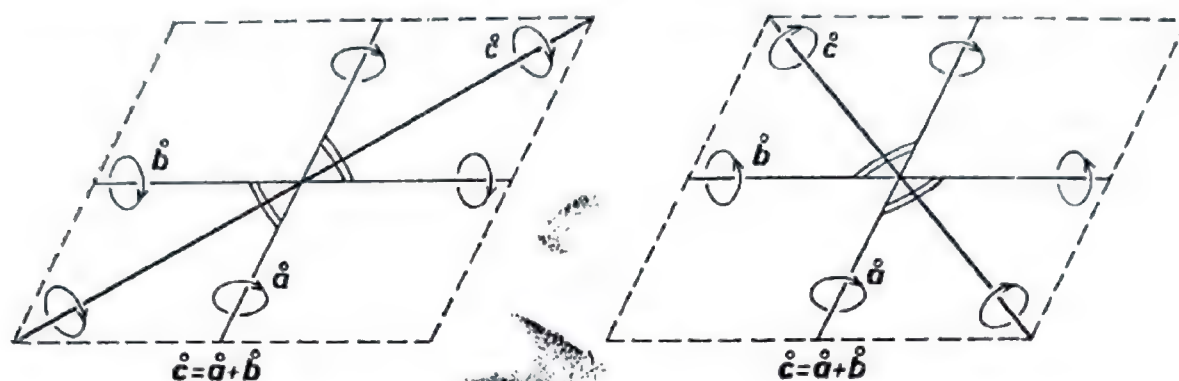


Fig. 23.3. Compunerea vectorilor axiali; regula paralelogramului.

La compunerea a doi vectori axiali, folosind regula triunghiului, vectorii \vec{a} și \vec{b} se așază unul la capătul celuilalt, astfel încît sensul circulațiilor să fie același de-a lungul întregii linii frînte astfel obținute. Unind capetele libere cu un segment și dîndu-i un sens de circulație contrar, obținem vectorul $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b}$. Ca și în cazul compunerii vectorilor polari, acest procedeu se generalizează ușor în regula liniei poligonale, care permite să se compună dintr-odată mai mulți vectori (fig. 23.4).

Produsul scalar a doi vectori axiali este egal cu produsul dintre lungimile vectorilor și cosinusul unghiului dintre ei: $\vec{a} \cdot \vec{b} = ab \cos \gamma$. Produsul scalar fiind astfel definit permite introducerea bazei ortonormate $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$, formată din vectori axiali ($\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$).

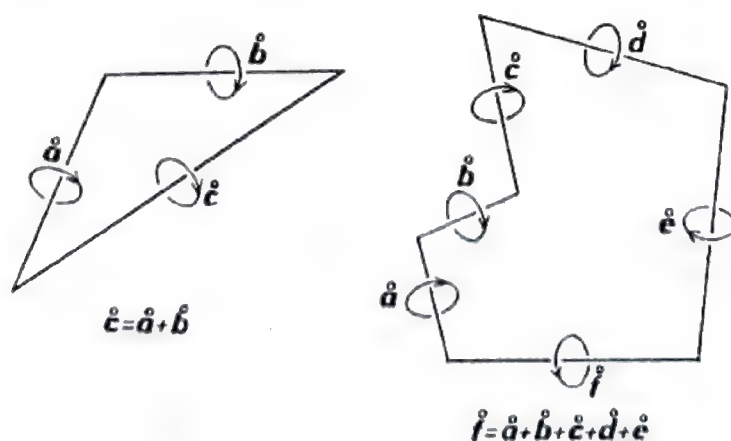


Fig. 23.4. Compunerea vectorilor axiali; regula triunghiului (a liniei poligonale).

Orice vector axial, \vec{a} , poate fi descompus în raport cu această bază

$$\vec{a} = a_i \vec{e}_i, \quad (23.1)$$

astfel încît

$$a_i = \vec{a} \cdot \vec{e}_i. \quad (23.2)$$

Este ușor de arătat că dacă $\vec{c} = \vec{a} + \vec{b}$, atunci $c_i = a_i + b_i$, și că $\vec{a} \cdot \vec{b} = a_i b_i$.

Legea de transformare a coeficienților descompunerii lui \vec{a}_i este la fel cu legea de transformare a componentelor unui vector polar : dacă

$$\vec{e}_i = c_{i'k} \vec{e}_k, \quad (23.3)$$

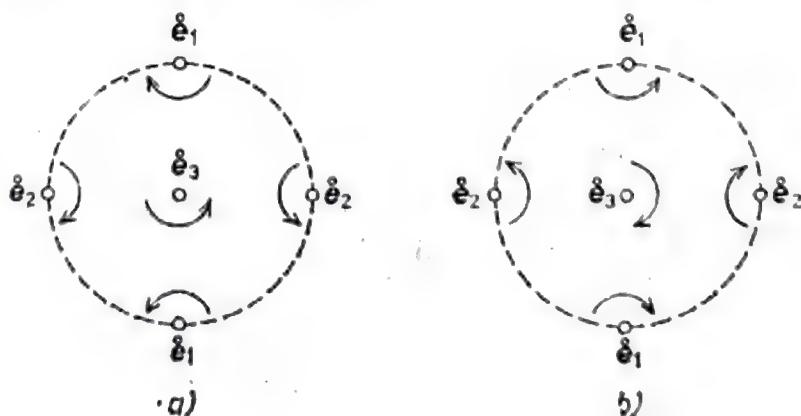
atunci

$$a_{i'} = c_{i'k} a_k. \quad (23.4)$$

Elementele matricei $\|c_{i'k}\|$ sînt cosinușii unghiurilor dintre vectorii axiali fundamentali $\vec{e}_{i'}$ și \vec{e}_k . Deoarece o bază axială este invariantă față de o inversie, atunci fie că este supusă unei rotații proprii, $R(\vec{k}, \varphi)$ cu unghiul φ în jurul vectorului unitar, \vec{k} , fie unei rotații cu inversie, $\bar{I}R(\vec{k}, \varphi)$, rezultă că matricea $\|c_{i'k}\|$ oricum coincide cu matricea rotației proprii corespunzătoare. Din această cauză pentru orice transformări ortogonale, $\det \|c_{i'k}\| = 1$.

Desigur, ne putem imagina și transformări ale bazei vectoriale axiale, cărora să le corespundă o matrice $\|c_{i'k}\|$ avînd determinantul -1 . Așa este, de pildă, transformarea configurației a în configurația b din figura 23.5 ; ea este descrisă de matricea $c_{i'k} = -\delta_{i'k}$. Însă astfel de transformări nu mai sînt ortogonale ; ele vor fi examinate în § 71. În cadrul grupului transformărilor ortogonale, bazele vectoriale axiale ortonormate se descompun însă în două clase. Două baze, care intră într-o clasă, se suprapun cu ajutorul a două transformări ortogonale : $R(\vec{k}, \varphi)$ și $\bar{I}R(\vec{k}, \varphi)$ cărora le corespunde una și aceeași matrice, $\|c_{i'k}\|$, avînd determinantul

Fig. 23.5. Transformarea unei baze vectoriale axiale cu determinantul -1 (proiecție stereografică). Baza b) nu se poate obține din baza a) prin nici un fel de transformare ortogonală.



egal cu $+1$. Bazele care aparțin însă unor clase diferite nu se pot suprapune prin nici o transformare ortogonală, versorii lor formînd între ei unghiuri astfel încît $\det \|\hat{e}_{i'k}\| = -1$:

În majoritatea problemelor de fizică, vectorii axiali se utilizează împreună cu cei polari, fiind de dorit ca ambele tipuri de vectori să fie raportați la aceeași bază. Potrivită acestui scop este numai baza polară, pentru că ea, spre deosebire de cea axială, se modifică esențial la fiecare transformare ortogonală.

Fie dată o bază vectorială polară ortonormată oarecare, $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$. Să construim pe ea baza axială, $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3$, astfel încît $\hat{\mathbf{e}}_1$ să coincidă cu \mathbf{e}_1 , $\hat{\mathbf{e}}_2$ să coincidă cu \mathbf{e}_2 , $\hat{\mathbf{e}}_3$ cu \mathbf{e}_3 , iar sensul de circulație în jurul vectorilor axiali ai bazei îi vom defini după numărul de ordine al vectorilor polari: sensul circulației în jurul lui $\hat{\mathbf{e}}_1$ se alege de la capătul vectorului \mathbf{e}_2 către capătul vectorului \mathbf{e}_3 , sensul circulației în jurul lui $\hat{\mathbf{e}}_2$, de la capătul lui \mathbf{e}_3 spre capătul lui \mathbf{e}_1 , în jurul lui $\hat{\mathbf{e}}_3$, de la capătul lui \mathbf{e}_1 către capătul lui \mathbf{e}_2 (fig. 23.6). Această definire a sensurilor circulațiilor este invariantă: ea se conservă pentru orice transformări ortogonale; pentru verificare este suficient să se supună figura obținută inversiunii (fig. 23.6). Remarcăm că în această definiție, sensul circulației în jurul axei $\hat{\mathbf{e}}_1$ este legat de sensurile vectorilor \mathbf{e}_2 și \mathbf{e}_3 și nu de sensul vectorului \mathbf{e}_1 .

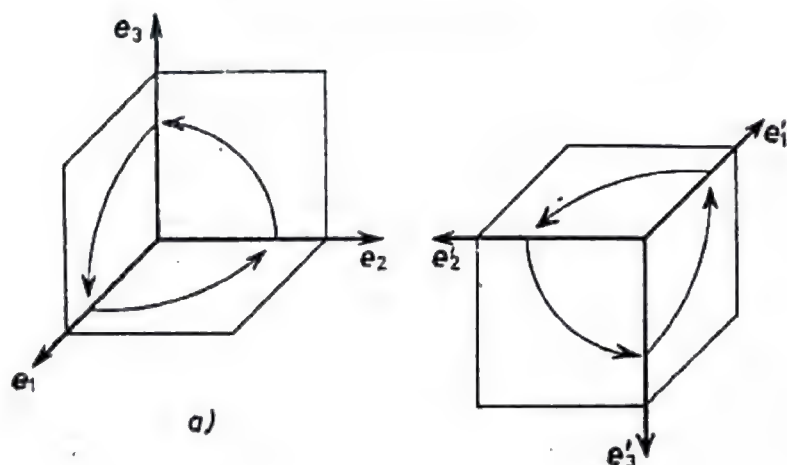


Fig. 23.6. Determinarea sensurilor de rotire în jurul vectorilor bazei (a) și păstrarea lor în cadrul inversiei (b).

Legătura dintre sensul circulației în jurul vectorului $\hat{\mathbf{e}}_1$ și sensul vectorului \mathbf{e}_1 , dimpotrivă nu mai este invariantă față de rotirile cu inversie. Anume, vectorul polar formează împreună cu un vector axial care coincide cu el, fie un șurub drept, fie unul stîng (fig. 23.7). În cazul rotațiilor proprii, șuruburile drepte rămîn drepte, iar cele stîngi, stîngi, pe cînd în cazul rotațiilor cu inversie denumirile șuruburilor se schimbă în cele contrare.

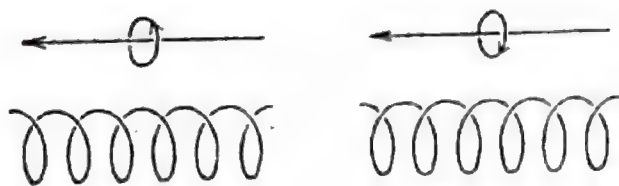


Fig. 23.7. Suprapunerea unui vector polar cu un vector axial : a) formează o elice dreaptă ; b) formează o elice stângă

Pe de altă parte, și tripletul vectorilor unei baze polare poate fi drept și stâng (se numește drept, dacă vectorul e_1 poate fi luat după degetul mare, e_2 , după degetul arătător, iar e_3 , după degetul mijlociu al mâinii drepte). În cazul rotațiilor proprii, tripletul drept rămâne drept, iar cel stâng rămâne stâng, pe cînd în cazul inversiilor tripletul drept se transformă în stâng, iar cel stâng în drept.

Cînd sensurile de circulație în jurul vectorilor axiali sînt definite după numărătoarea vectorilor polari cu care coincid, ambele baze sînt în concordanță : denumirea șuruburilor formate din perechi de vectori care se suprapun coincide cu denumirea tripletelor de vectori polari ; dacă, de exemplu e_1, e_2, e_3 este un triplet drept, atunci șuruburile formate din vectorii e_1 și \hat{e}_1 , e_2 și \hat{e}_2 , e_3 și \hat{e}_3 sînt tot drepte. Concordanța bazelor polare și axiale este invariantă față de orice transformări ortogonale.

Rezultă deci că unei baze polare date, îi corespunde o bază axială și numai una, legătura dintre ele rămînînd aceeași pentru toate transformările ortogonale (dimpotrivă, fiecărei baze axiale îi corespund două baze polare). Tocmai acest fapt permite să raportăm la baza polară, nu numai componentele vectorilor polari, ci și pe cele ale vectorilor axiali. Cînd o bază polară este supusă transformării ortogonale $e_{i'} = c_{i'k} e_k$, baza axială legată de ea se transformă după legea $\hat{e}_{i'} = \hat{e}_{i'k} e_k$, astfel încît $\hat{e}_{i'k} = c_{i'k}$ în cazul rotațiilor proprii, pe cînd $\hat{e}_{i'k} = -c_{i'k}$ în cazul inversiilor. Notînd cu $\Delta = \det \|c_{i'k}\|$, acest fapt se poate exprima sub forma

$$\hat{e}_{i'k} = \Delta c_{i'k}. \quad (23.5)$$

Coeficienții a_i ai descompunerii,

$$\hat{a} = a_i e_i, \quad (23.6)$$

a unui vector axial, \hat{a} , după o bază polară, sînt egali, conform definiției, cu coeficienții \hat{a}_i ai descompunerii acestora după baza axială legată de baza polară dată ; ei pot fi denumiți simplu componentele vectorului axial, \hat{a} . Legea lor de transformare se deduce din compararea formulelor (23.4) și (23.5)

$$a_{i'} = \Delta c_{i'k} a_k. \quad (23.7)$$

Din relația (23.6) rezultă că componentele vectorului axial

$$a_i = \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_i \quad (23.8)$$

sînt produsele scalare dintre vectorul axial și cel polar.

În cazul general, produsul scalar dintre un vector axial, $\mathbf{a} = a_k \mathbf{e}_k$, și unul polar, $\mathbf{p} = p_l \mathbf{e}_l$, este egal cu

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{p} = (a_k \mathbf{e}_k) \cdot (p_l \mathbf{e}_l) = a_k p_k. \quad (23.9)$$

Legea lui de transformare rezultă din legile de transformare a componentelor vectorului axial, (23.7), și a celui polar, (18.1),

$$a_{i'} p_{i'} = \Delta c_{i'k} a_k c_{il} p_l = \Delta \delta_{kl} a_k p_l = \Delta a_k p_k \quad (23.10)$$

(aici s-a aplicat formula (17.4)). Prin urmare, acest produs scalar este invariant față de rotațiile proprii ale sistemului de coordonate, dar se înmulțește cu -1 , în cazul rotațiilor cu inversie. Astfel de mărimi se numesc *mărimi pseudoscalare*; legea de transformare a lor are forma

$$\psi' = \Delta \psi, \quad (23.11)$$

unde ψ este componenta pseudoscalarului în vechiul sistem de coordonate, ψ' , în noul sistem, iar Δ , determinantul matricei transformării ortogonale, care transpune sistemul vechi în sistemul nou.

Ca exemplu de pseudoscalar poate fi considerată rotația specifică a planului de polarizare a substanțelor izotrope sau optice izotrope, care rotesc planul de polarizare (soluția apoasă de zahăr, cristalele cubice NaClO_3 și NaBrO_3 și altele). Această mărime se consideră pozitivă, dacă sensul de rotație a planului de polarizare este dat de un șurub de același nume ca șurubul sistemului de coordonate și negativă, în caz contrar (vezi § 81). Deoarece în cazul rotației cu inversie a unui sistem de coordonate, felul șurubului ce îl caracterizează se schimbă, mărimea rotației specifice față de noul sistem de coordonate și aceeași mărime față de sistemul vechi vor avea semne contrare. În mod obișnuit, rotația specifică se raportează la un sistem de coordonate drept.

Produsul scalar dintre un vector axial și unul polar poate fi definit și pur geometric (fig. 23.8): el este egal cu produsul dintre mărimile vectorilor și cosinusul unghiului dintre ele; dintre cele două unghiuri posibile (care sînt suplimentare între ele), se ia acela, care prin rotația unuia dintre vectori cu acest unghi pentru a-l aduce în coincidență cu al doilea, se obține un șurub de același fel cu cel corespunzător bazei (sau sistemului de coordonate construit pe el). Astfel, produsul scalar dintre un vector

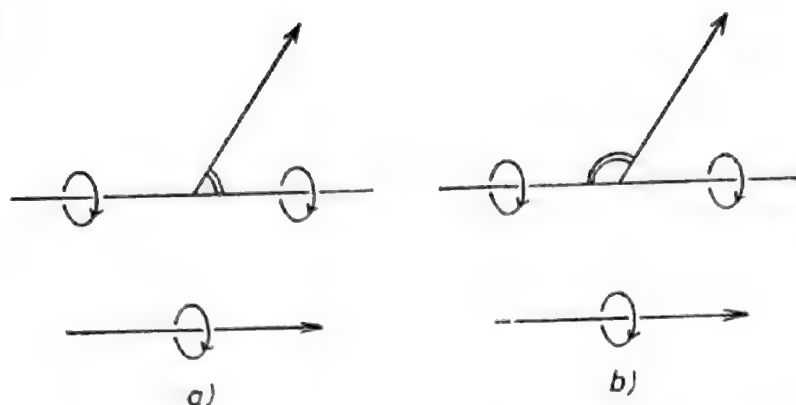


Fig. 23.8. Definierea unghiului dintre un vector polar și unul axial : a) cind unghiul dintre vectorul polar și cel axial se ia într-un sistem de coordonate drept; b) unghiul dintre aceiași vectori, într-un sistem de coordonate stîng.

polar și unul axial are sens numai în cazul în care este definit un anumit sistem de coordonate, mai exact, în cazul în care se dă tipul sistemului de coordonate (drept sau stîng).

Să trecem la examinarea produselor vectoriale. Prin definiție, produsul vectorial a doi vectori polari, $\mathbf{p} \times \mathbf{q}$, este vectorul axial cu lungimea $pq \sin \alpha$, perpendicular pe ambii factori, al cărui sens de circulație coincide cu sensul rotației care aduce primul factor peste al doilea (fig. 23.9 a).

Produsul vectorial a doi vectori axiali se definește exact la fel (fig. 23.9, b).

Produsul vectorial dintre un vector axial și unul polar, $\mathbf{a} \times \mathbf{p}$, este vectorul polar de lungime $ap \sin \alpha$, perpendicular pe

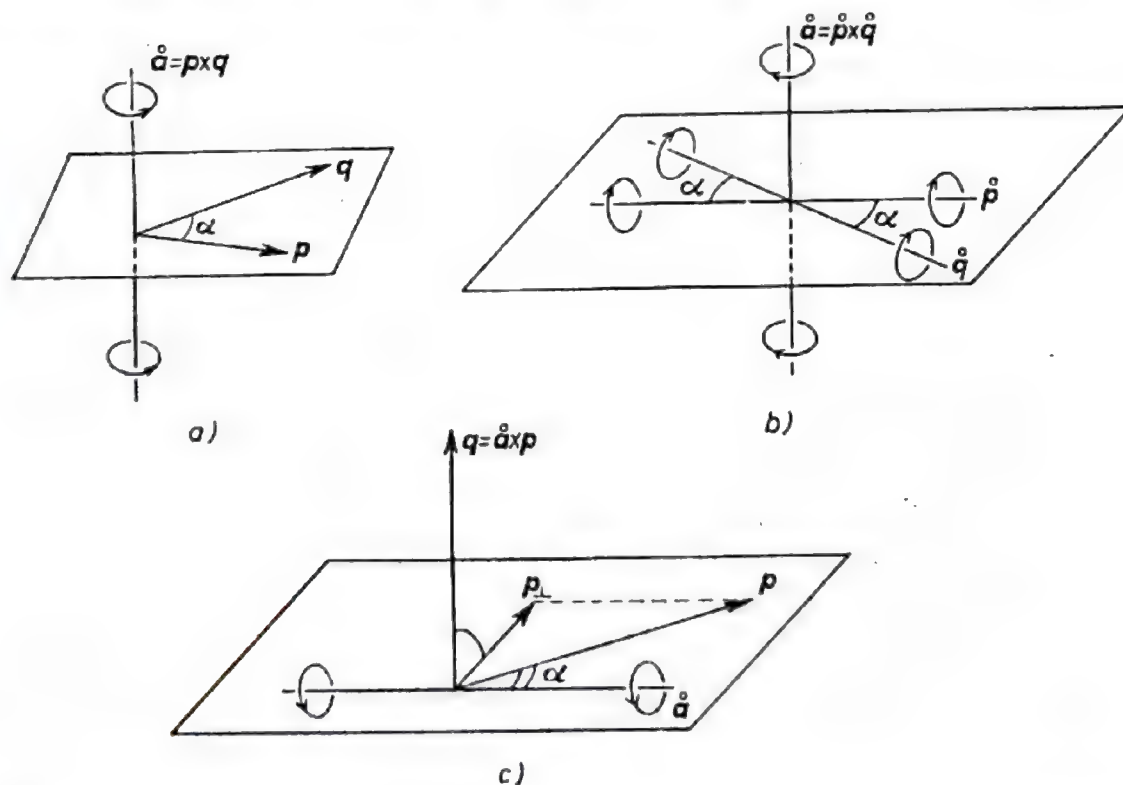


Fig. 23.9. Înmulțirea vectorilor : a) a doi vectori polari ; b) a doi vectori axiali ; c) a unul vector axial cu unul polar.

ambii factori și orientat în sensul în care s-ar orienta componenta p_{\perp} a vectorului \mathbf{p} , perpendiculară pe \mathbf{a} , după o rotație cu $\pi/2$ în jurul vectorului \mathbf{a} în sensul de rotație al acestuia (fig. 23.9,c). În acest caz, o anumită indeterminare a unghiului dintre vectorul polar și cel axial nu are însemnătate, deoarece $\sin(\pi - \alpha) = \sin \alpha$. În cazul permutării factorilor sensul acestui produs vectorial, așa cum s-a arătat mai înainte, se schimbă în cel contrar.

Pentru scrierea componentelor tuturor acestor produse vectoriale este posibilă o formă unică: fie $\mathbf{c} = \mathbf{b} \times \mathbf{d}$, în care fiecare dintre vectorii \mathbf{b} și \mathbf{d} poate fi considerat atât ca vector polar cât și ca axial, iar tipul vectorului \mathbf{c} este definit de tipul vectorilor factori. Atunci

$$c_i = \delta_{ijk} b_j d_k. \quad (23.12)$$

Această formă este valabilă și pentru scrierea operației diferențiale rot. După cum se știe, o funcție vectorială de coordonate, $\mathbf{u} = \text{rot } \mathbf{v}$, poate fi reprezentată sub forma $\mathbf{u} = \nabla \times \mathbf{v}$, în care vectorul simbolic ∇ este $\nabla = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$. Deci componentele vectorului $\mathbf{u} = \text{rot } \mathbf{v}$ vor fi

$$u_i = \delta_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}. \quad (23.13)$$

Bazele calculului tensorial sînt expuse în multe manuale, de exemplu Akivis și Goldberg (1969); Borisenko și Tarapov (1966); Vakulenko (1972); Mac Connel (1963); Rașevski (1964); Shouten (1965). În afară de aceasta, în unele monografii și manuale de mecanică a mediilor continue și de fizică a cristalelor există secțiuni consacrate calculului tensorial: Lure (1970); Nye (1967); Sedov (1962); F. I. Fiodorov (1965).



INTRODUCERE ÎN FIZICA CRISTALELOR. PROPRIETĂȚILE ELECTRICE ȘI PROPRIETĂȚILE TERMICE ALE CRISTALELOR

§ 24. MEDIILE CONTINUE ANIZOTROPE

Noțiunea inițială fundamentală a oricărei teorii a unui mediu continuu este *volumul elementar*, adică partea separată mintal din materialul studiat, ale cărei dimensiuni satisfac două necesități :

1) trebuie să includă atît de multe unități structurale (în cazul unui cristal — celule elementare, în cazul unei sticle plastice — fibre individuale de sticlă etc.), încît să poată fi considerată cu suficientă exactitate omogenă ;

2) este atît de mică, încît se poate neglija variația cîmpurilor fizice pe toată întinderea ei : în limitele unui singur volum elementar, cîmpurile fizice (electric, magnetic, cîmpul tensiunilor mecanice ș.a.) se consideră omogene. Notînd constanta rețelei cu

a , dimensiunea caracteristică a volumului elementar este $\sqrt[3]{v}$, iar gradientul cîmpului, $\partial E / \partial x$ (pentru a fixa ideile se consideră cîmpul electric), ambele condiții pot fi scrise sub formă de inegalitate

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \frac{E}{\partial E / \partial x}. \quad (24.1)$$

Dacă cîmpul este periodic în spațiu și se caracterizează printr-o lungime de undă λ , atunci (24.1) capătă forma

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \lambda. \quad (24.2)$$

Din faptul că un mediu continuu este omogen în limitele unei celule elementare, nu rezultă încă și faptul că el este omogen în întregime, adică nu rezultă că proprietățile tuturor volumelor elementare sînt identice. De aici rezultă numai că proprietățile unor volume elementare vecine sînt la fel. Luînd drept exemplu permitivitatea, κ , se poate scrie, pentru orice mediu continuu, inegalitatea

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \frac{\kappa}{\partial \kappa / \partial x},$$

sau

$$\frac{\partial \kappa}{\partial x} \ll \frac{\kappa}{a},$$

pe cînd, într-un mediu omogen,

$$\frac{\partial \kappa}{\partial x} \equiv 0.$$

Studiind acțiunea cîmpurilor fizice asupra unui cristal, cîmpuri a căror lungime de undă este mult mai mare decît dimensiunile unui celule elementare, putem face abstracție de structura microscopică a cristalului, adică să ni-l imaginăm ca pe un mediu continuu, dat. Dimpotrivă, în efectele interacțiunii substanței cristaline cu cîmpuri de lungimi de undă comparabile cu dimensiunile unei celule elementare, se manifestă structura discretă a cristalului, ceea ce permite tocmai utilizarea acestor efecte în studiul structurii cristalului.

Aici cristalele sînt examinate ca medii continue anizotrope omogene. Un *mediu anizotrop omogen* este acel mediu ale cărui proprietăți nu depind de coordonatele carteziane, în ciuda faptului că depind de o direcție. În acest caz, se consideră direcții identice direcțiile paralele, iar planuri identice, planurile paralele.

Uneori astfel de medii se numesc medii *rectiliniu-anizotrope*, spre deosebire de *mediile curbiliniu-anizotrope* — de exemplu, mediile cilindric-anizotrope sau sferic-anizotrope. Noi vom considera însă omogene numai mediile rectiliniu-anizotrope. Ar fi de dorit ca definirea omogenității să fie invariantă, adică materialul s-ar considera omogen sau neomogen independent de sistemul de coordonate în care este el studiat. Iar pentru aceasta, este necesară condiția anulării nu a derivatelor parțiale ci a derivatelor covariante în raport cu coordonatele tensorilor care caracterizează proprietățile unui material. Întrucît pentru anularea derivatelor covariante în raport cu orice coordonate curbilinii, este necesară și suficientă anularea derivatelor parțiale în raport cu coordonatele carteziane, sînt într-adevăr omogene numai materialele rectiliniu-anizotrope.

Anizotropia proprietăților fizice ale cristalului se stabilește pe calea măsurării acestor proprietăți pe mostre cristaline orientate diferit. Astfel, anizotropia dilatării termice a cristalelor se poate elucida măsurînd variațiile relative ale grosimii, $\Delta a/a$, pentru lamele cristaline orientate diferit, la o încălzire a lor cu Θ grade. *Coeeficientul de dilatare termică* al unei lamele, a cărei orientare este dată de indicii Miller (hkl), este

$$\alpha_{(hkl)} = \frac{(\Delta a/a)_{(hkl)}}{\Theta}$$

Analog, anizotropia modulului lui Young se poate studia prin măsurarea alungirilor relative, $\Delta l/l$, a unor bare cristaline orientate diferit, sub acțiunea unui efort unitar de întindere, σ : pentru bara $[uvw]$ modulul lui Young este

$$E_{[uvw]} = \frac{\sigma}{(\Delta l/l)_{[uvw]}}.$$

Proprietățile elastice ale materialelor sînt caracterizate nu numai cu ajutorul modulului Young, ci și cu ajutorul modulului de torsiune a cilindrului, G . Măsurînd unghiurile de torsiune relative, φ/l , ale unor bare cristaline rotunde, orientate diferit, sub acțiunea momentului de torsiune K , obținem pentru bara $[uvw]$ modulul de torsiune

$$G_{[uvw]} = \frac{K/J}{(\varphi/l)_{[uvw]}},$$

unde J este momentul polar de inerție al secțiunii transversale a barei. Adesea se utilizează mărimile inverse: E^{-1} și G^{-1} ; ele se numesc *coeficientul de întindere* și *coeficientul de torsiune* (aceste noțiuni vor fi examinate mai amănunțit în capitolul 6: coeficientul de dilatare termică, în §§ 51 și 52, modulul Young, în § 53, iar modulul de torsiune al cilindrului, în § 54).

Orientarea barelor cristaline și a lamelor cristaline poate fi dată și cu ajutorul vectorului unitar, \mathbf{n} , luat după axa barei sau după normala lamei (relativ la legătura dintre componentele sale și indicii Miller vezi § 16). Componentele n_i ale vectorului \mathbf{n} , pot fi exprimate, la rîndul lor, cu ajutorul formulelor (22.5) în funcție de coordonatele sferice — unghiurile θ și φ (vezi, de asemenea, figura 22.1). Drept urmare, coeficientul de dilatare termică, modulul Young și modulul de torsiune al cilindrului sînt exprimate sub forma unor funcții de vectorii unitari, $\alpha(\mathbf{n})$, $E(\mathbf{n})$, $G(\mathbf{n})$, sau de coordonatele sferice $\alpha(\theta, \varphi)$, $E(\theta, \varphi)$, $G(\theta, \varphi)$.

Dacă dintr-un punct oarecare O — originea sistemului de coordonate sferice — se duc toate razele posibile, definite prin unghiurile θ și φ , și se iau pe ele, la o anumită scară, mărimile $\alpha(\theta, \varphi)$ sau $E(\theta, \varphi)$, se obțin suprafețele coeficientului de dilatare și modulului Young; modele de astfel de suprafețe, pentru unele cristale, sînt reprezentate în figurile 24.1, a, 24.2, a, 24.4, 24.5, 24.7, 24.8 a, 24.9. Modele de suprafețe, chiar dacă sînt foarte intuitive, sînt și greu de realizat și puțin utile în evaluările cantitative. Din acest punct de vedere, ceva mai comode sînt *secțiunile suprafețelor* (vezi figurile 24.5, 24.8, b, 24.10). Însă și ele permit

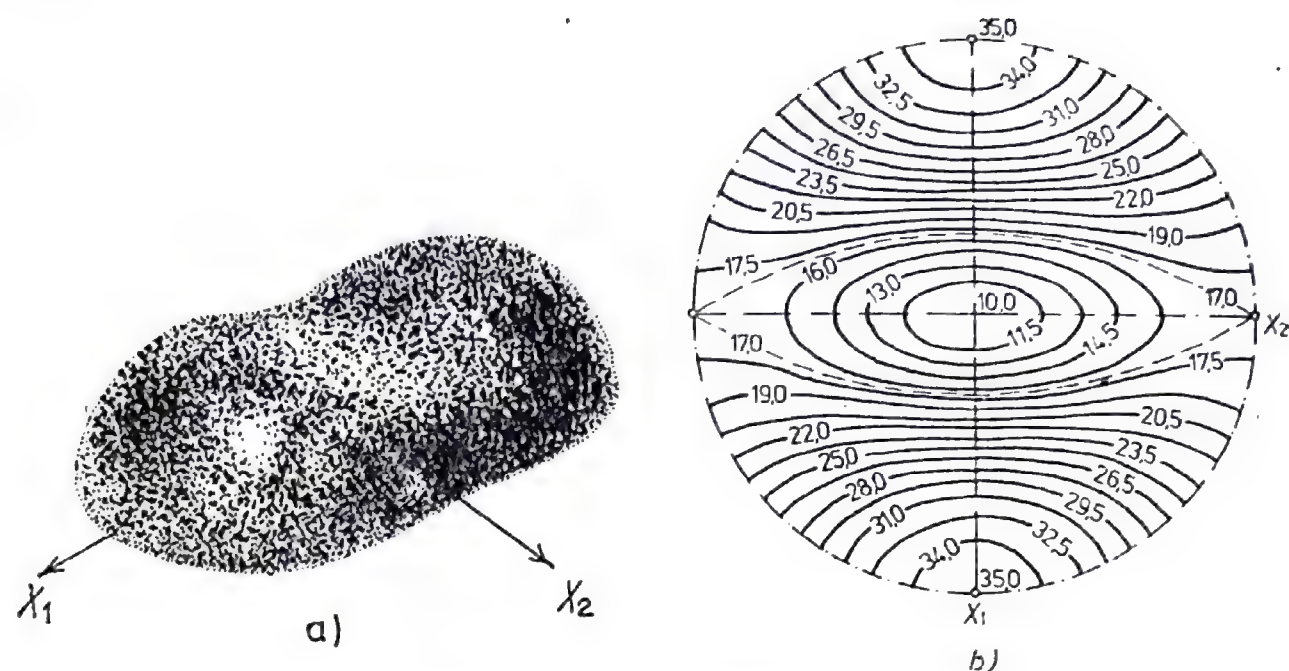


Fig. 24.1. a) Modelul jumătății superioare a suprafeței coeficientului de dilatare termică a aragonitului, clasa *mmm*; b) proiecția ei stereografică, în $10^{-6} \text{ grad}^{-1}$. Jumătatea inferioară este reflectarea de oglindire a celei superioare (Butabaev și Sirotin, 1973)

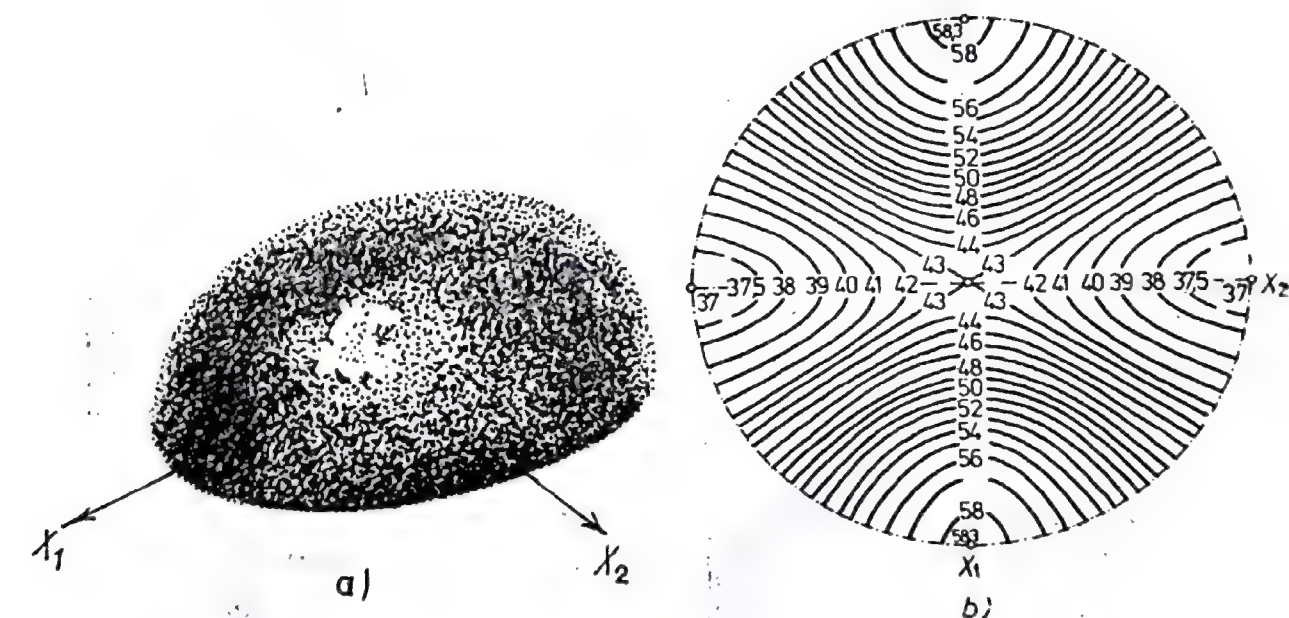


Fig. 24.2. Modelul jumătății superioare (cea inferioară este reflexia de oglindire a jumătății superioare) a suprafeței coeficientului de dilatare termică pentru cristalul de sare Seignette, clasa 222 (a) și proiecția ei stereografică, în $10^{-6} \text{ grad}^{-1}$ (b). Deosebirile de formă dintre proiecțiile stereografice din figurile 24.1 și 24.2 se explică prin faptul că la aragonit centrului proiecției (axa X_3) îi corespunde valoarea extremă a funcției, pe cînd la sarea Seignette — punctul de inflexiune al acestei funcții.

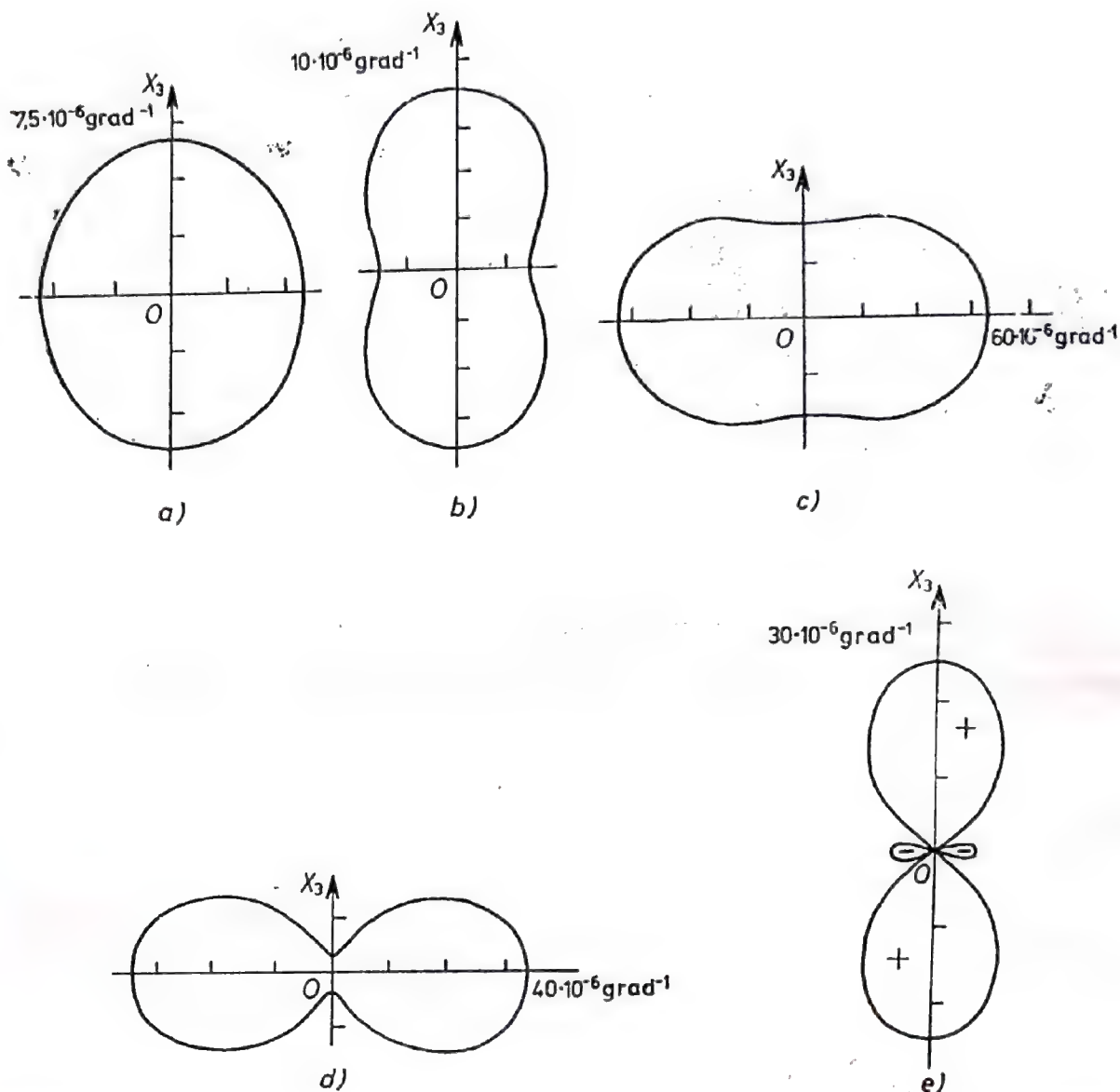


Fig. 24.3. Secțiuni ale suprafețelor coeficientului de dilatare termică, în cazul în care acestea sînt suprafețe de rotație: a) pentru un cristal de safir, clasa $\bar{3}m$; b) pentru turmalină, clasa $3m$; c) pentru dihidrofosfat de potasiu (KDP), clasa $\bar{4}2m$; d) pentru dihidrofosfat de amoniu (ADP), clasa $\bar{4}2m$; pentru calcit, clasa $\bar{3}m$ (Butabaev și Sirotin, 1972).

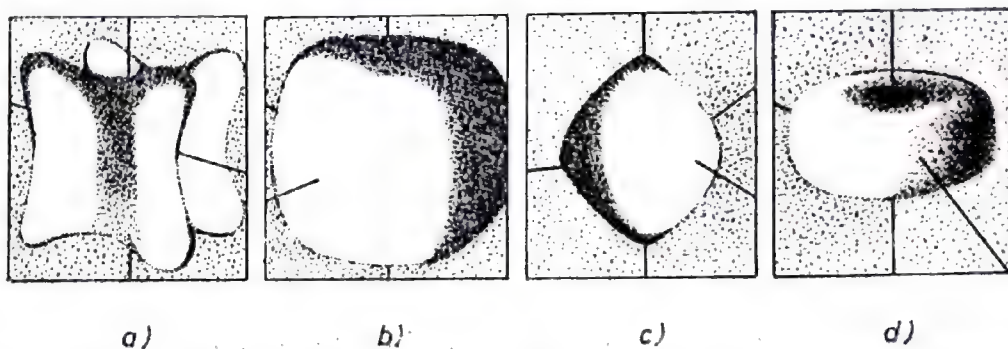


Fig. 24.4. Modele de suprafețe ale modulului Young: a) pentru monocristalul de aur, clasa $m\bar{3}m$; b) pentru aluminiu, clasa $m\bar{3}m$; c) pentru magneziu, clasa $6/mmm$; d) pentru zinc, clasa $6/mmm$. Simetria primelor două suprafețe este $m\bar{3}m$, iar a celorlalte ∞/m (Kleber, 1969).

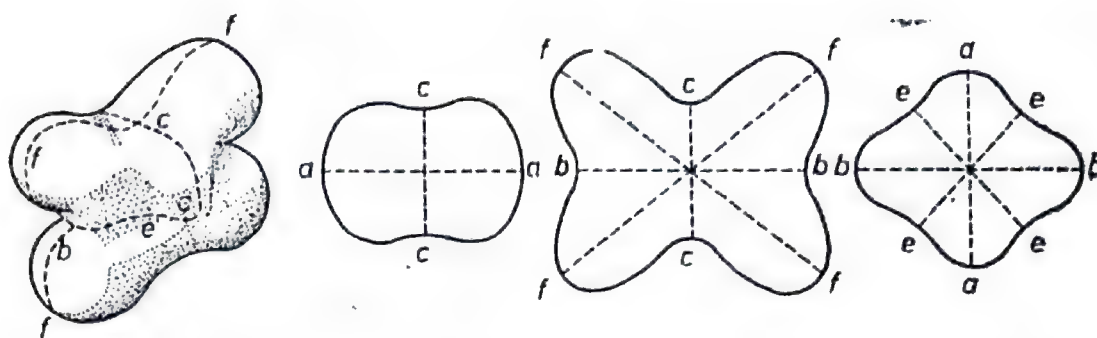


Fig. 24.5. Suprafața coeficientului de întindere pentru cristallul de barită, clasa mmm , și secțiunea ei; literele a, b, \dots indică poziția secțiunilor în raport cu suprafața (Groth, 1897),

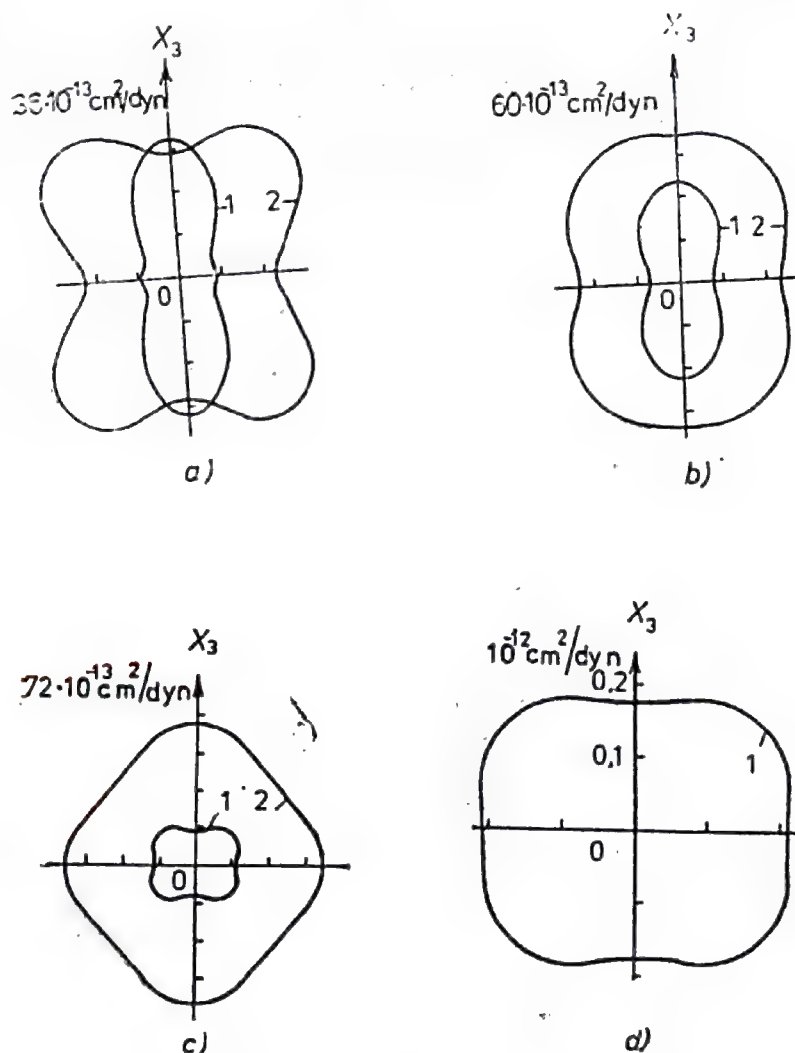
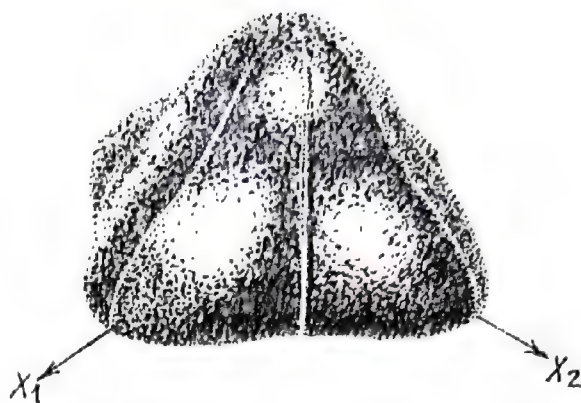


Fig. 24.6. Secțiunile suprafețelor proprietăților elastice, care reprezintă suprafețe de rotație: a) pentru cristale de zinc, clasa $6/mmm$; b) pentru cadmiu, clasa $6/mmm$; c) pentru sulfura de cadmiu (CdS), clasa $6mm$; d) pentru carbură de siliciu, clasa $6mm$; 1 — secțiunea suprafeței coeficientului de întindere; 2 — secțiunea suprafeței coeficientului de forsiune (Butabaev și Sirotin, 1972).

Fig. 24.7. Jumătatea superioară a modelului suprafeței coeficientului de întindere al cristalului de siliciu, clasa $m\bar{3}m$ (jumătatea inferioară este reflexia de oglindire a jumătății superioare) (Butabaev și Sirotn, 1971).



evaluarea mărimii caracteristice care o reprezintă numai după anumite direcții. Uneori suprafața este o suprafață de rotație, caz în care ne putem da seama după secțiunea suprafeței de valoarea proprietății după toate direcțiile (vezi figurile 24.3 și 24.6). În restul cazurilor, pentru aceasta sînt necesare *proiecții stereografice ale suprafețelor* mărimilor fizice (vezi figurile 24.1, b, 24.2,

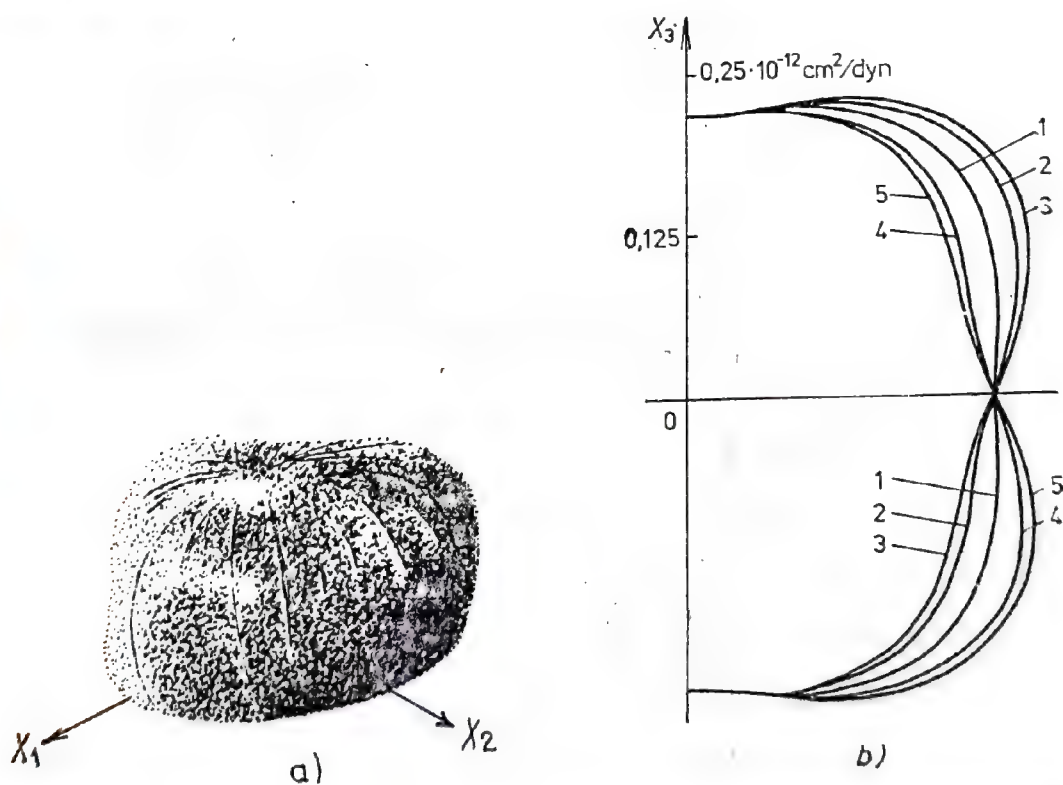


Fig. 24.8. a) Jumătatea superioară a modelului suprafeței coeficientului de întindere al cristalului de safir, clasa $3m$ (jumătatea ei inferioară se obține din cea superioară prin reflexia într-un centru); b) secțiuni ale suprafeței cu planuri verticale: 1 — cu planul care trece prin X_1 , 2 — cu planul care se află în urmă față de primul cu $+15^\circ$, 3 — cu $+30^\circ$, 4 — cu -15° , 5 — cu -30° ; semnele unghiurilor corespund rotației în sensul pozitiv al axei $X_2(+)$, sau în sensul negativ al ei $(-)$ (Butabaev și Smislov, 1971).

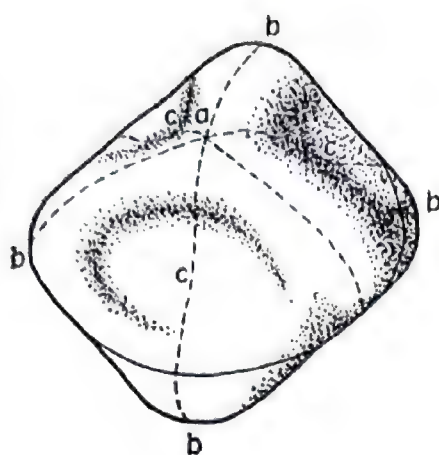


Fig. 24.9. Suprafața coeficientului de întindere al cristalului de cuarț, clasa 32. Notățiile : a — punctul de ieșire al direcției $[0001]$; b, b și c, c — capetele diametrelor maxime și, respectiv, minime, care sînt cîte trei de fiecare fel. Linia continuă este secțiunea circulară a suprafeței cu planul (0001) . Linile punctate sînt secțiuni ale suprafeței cu planurile (2110) . Simetria suprafeței este $\bar{3}m$ (Groth, 1897).

$b, 24.11$). Să examinăm, de pildă, figura 24.1, b , — proiecție stereografică a suprafeței coeficientului de dilatare termică a aragonitului, reprezentată în figura 24.1, a . După cum se știe (vezi § 2), fiecărei direcții a semisferei superioare îi corespunde un anumit punct al cercului proiecției stereografice. Liniile din proiecția stereografică a suprafeței sînt formate din punctele care corespund acelor direcții în care coeficientul de dilatare termică al aragonitului este același, și anume acelea în care $\alpha(\theta, \varphi) = 10,0; 11,5; 13,0; \dots; 32,5; 34,0; 35,0 \cdot 10^{-6} \text{ grad}^{-1}$. Astfel, acestea sînt liniile de nivel ale funcției $\alpha(\theta, \varphi)$.

Proiecțiile stereografice ale suprafețelor pot fi utilizate ca nomograme pentru determinarea unei mărimi care caracterizează o anumită proprietate în orice direcție dată sau pentru determinarea unor direcții în care această mărime are o valoare dată (în particular extremă). Pentru aceasta este necesară o rețea polară de același diametru ca și proiecția considerată; ea poate fi dese-

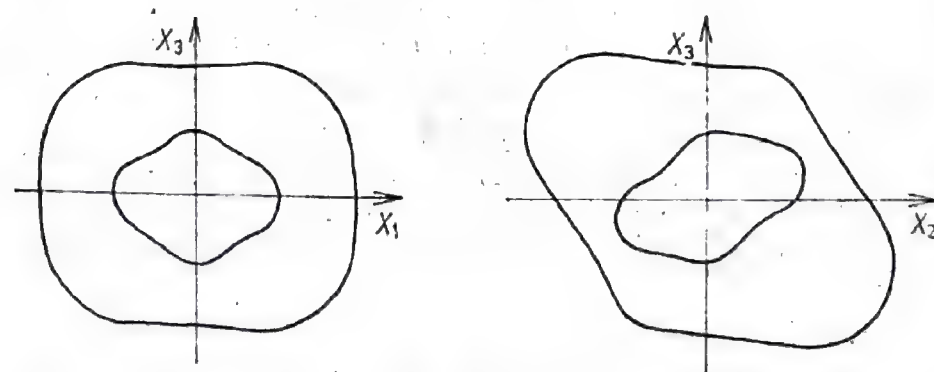


Fig. 24.10. Secțiunile suprafețelor coeficientului de întindere (în interior) și a coeficientului de torsiune (în exterior) ale cristalului de cuarț, clasa 32, cu planurile de coordonate (Wooster, 1949). Compară cu figurile 24.9 și 24.11 (sistemul de coordonate cristalofizic din figura 24.11 se deosebește de cel utilizat aici, fiind rotit cu 180° în jurul axei X_3).

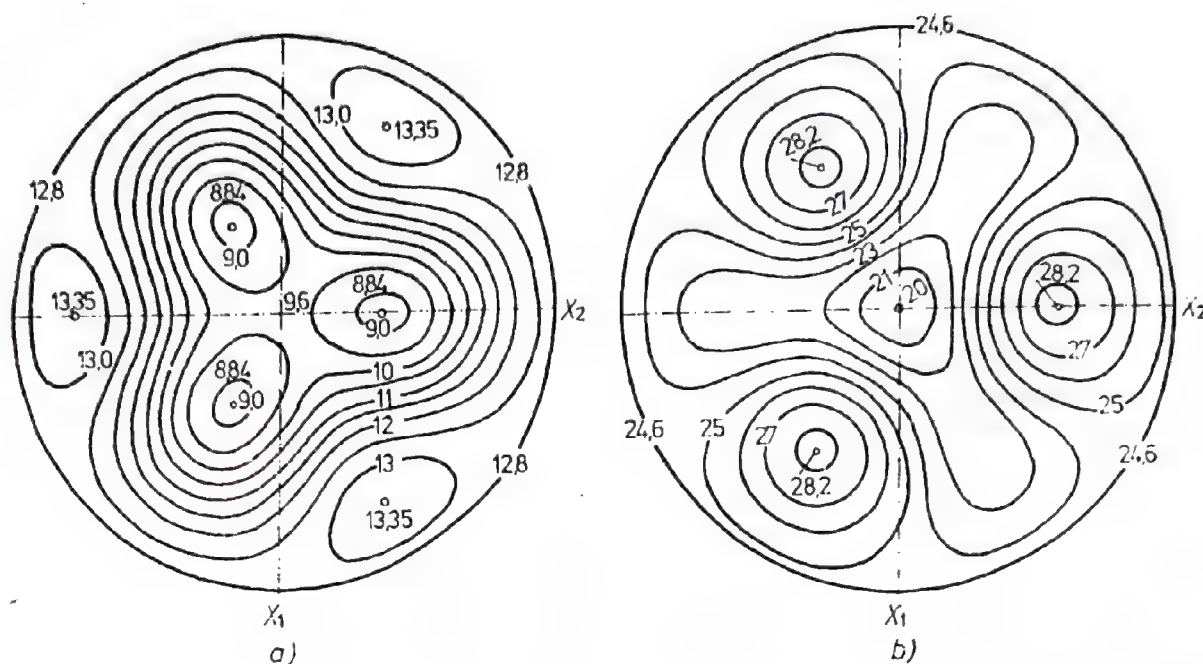


Fig. 24.11. Proiecția stereografică a suprafețelor coeficientului de întindere (a) și coeficientului de torsiune (b), pentru cristalul de cuarț, clasa 32, în 10^{-13} cm/dyn. Cercurile inferioare ale proiecțiilor stereografice se obțin din cele reprezentate prin rotirea cu 180° în jurul axei X_1 . Se vede că un plan $(\bar{2}110)$ (în particular planul $X_2 X_3$) este un plan de simetrie al acestor suprafețe, al cărui grup punctual este $\bar{3}m$. Compară cu figurile 24.9 și 24.10.

nată simplu pe o hîrtie transparentă. Dacă pe rețea sînt trasate planurile și direcțiile cristalografice, se pot determina și caracteristicile cantitative ale proprietăților acestor planuri și direcții, de exemplu, $\alpha_{[hkl]}$, $E_{[uvw]}$ sau $G_{[uvw]}$.

Multe dintre mărimile ce caracterizează proprietățile cristalelor după orice direcție sînt pozitive; astfel sînt, de pildă, modulul lui Young și modulul de torsiune al cilindrului, dar sînt și altele care pot căpăta atît valori pozitive cît și valori negative, de exemplu, coeficientul de dilatare termică al calcitului (fig. 24.3, e). Partea din suprafață ce corespunde valorii negative a mărimii care exprimă proprietatea dată se colorează în negru iar partea pozitivă în alb (vezi suprafețele vectorilor și tensorilor de rangul doi, fig. 22.3, 22.2), sau se notează simplu cu semnele „minus” și „plus”.

§ 25. PRINCIPIUL SIMETRIEI ÎN FIZICA CRISTALELOR

Din punctul de vedere al fizicii cristalelor, cele 39 de clase cristalografice și clase limită constituie 39 de tipuri posibile de interacțiune a anizotropiei cu simetria într-un mediu continuu, sînt 39 de tipuri de confruntare a acestor doi factori. Una dintre

ele — clasa 1 — se caracterizează prin victoria necondiționată a anizotropiei în această înfruntare : în cristalele acestei clase anizotropia poate apărea pe deplin, nimic nu o stânjenește. Două clase limită — $\infty\infty m$ și $\infty\infty$ — se remarcă însă printr-o înfrângere zdrobitoare a ei : în mediile care au o astfel de simetrie toate direcțiile sînt echivalente, aceasta însemnînd că în ele, anizotropia este imposibilă. Fiecare dintre celelalte 36 de clase se caracterizează prin restricții riguros determinate, impuse anizotropiei diferitelor proprietăți fizice. Aceste limitări reprezintă consecința logică a simetriei cristalului.

Problema influenței simetriei cristalului asupra proprietăților lui reprezintă numai o parte din problema mult mai generală, a rolului simetriei în fizică și, mai mult decît atît, în cunoștințele teoretice asupra naturii în întregime (vezi Șubnikov și Koptîk, 1972). Principiul general, care definește influența simetriei asupra tuturor fenomenelor fizice, fără excepție, a fost formulat de către Pierre Curie în 1893—1895 : „Cînd anumite principii provoacă anumite consecințe, atunci elementele de simetrie ale cauzelor trebuie să se manifeste în cadrul consecințelor provocate de ele.

Cînd în cazul unor fenomene date se manifestă o anumită disimetrie, aceeași disimetrie trebuie să apară și în cauzele care au generat-o*.

Afirmațiile reciproce acestora nu sînt adevărate, cel puțin în cadrul practicii ; cu alte cuvinte, consecințele pot avea o simetrie mult mai înaltă decît cauzele care le-au produs” (P. Curie, 1968, p. 22).

Toate proprietățile cristalelor sînt determinate de structura lor. De aceea, aplicat proprietăților cristalelor, principiul Curie susține că toate elementele de simetrie ale unui cristal sînt în același timp elemente de simetrie pentru orice proprietate a lui ; invers, orice disimetrie a unei anumite proprietăți a unui cristal atestă o disimetrie corespunzătoare în construcția cristalului.

Această afirmație poate fi precizată ceva mai bine. Examinînd simetria oricărei proprietăți macroscopice a unui cristal trebuie să se considere că fizic parametrii unei celule sînt infinit mici, ceea ce se întîmplă și cu translațiile elementare în care intră grupul spațial al cristalului. De aici rezultă două concluzii importante. În primul rînd, din simetria de translație a cristalului rezultă omogenitatea cristalului față de orice proprietate macroscopică ; cu alte cuvinte, dacă cristalul este analizat ca un mediu

* Trebuie făcută distincție între termenii „asimetrie” și „disimetrie”. „Propunem în deplină concordanță cu gramatica acestor cuvinte — scrie relativ la aceasta A.V. Șubnikov (1951, p. 160), — ca prin asimetrie să se înțeleagă lipsa simetriei, iar prin disimetrie, defectul în simetrie”.



continuu, el trebuie considerat un mediu continuu omogen. În al doilea rând, dacă translațiile elementare sînt infinit mici, fracțiunile lor sînt cu atît mai mici, de unde rezultă c  pentru propriet țile macroscopice, deosebirile dintre axele simple  i cele elicoidale, dintre planurile de oglindire  i planurile de oglindire cu alunecare, s nt complet neesențiale. Astfel, simetria propriet ților macroscopice ale cristalelor este determinat  de grupul punctual de simetrie a cristalului, nu de cel spațial; aceast  concluzie coincide cu cunoscutul principiu al lui Neumann (Neumann, 1885), a c rui formulare modern  se enunț  astfel: „Elementele de simetrie ale oric rei propriet ți fizice ale unui cristal trebuie s  includ  elemente de simetrie ale grupului punctual al cristalului” (importanța fundamental  a acestei afirmații pentru teoria fizicii cristalelor a fost afirmat   n repetate r nduri de Voigt, care l-a  i denumit principiul Neumann-Voigt, 1928). Astfel, principiul lui Neumann poate fi considerat drept o consecinț  a principiului Curie, cu toate c  a fost stabilit mai  nainte a lui  i a jucat un rol substanțial  n dezvoltarea fizicii cristalelor*.

 n limbajul teoriei grupurilor, principiul lui Neumann afirm  c  grupul de simetrie al oric rei propriet ți a unui cristal include grupul de simetrie al cristalului  nsuși, adic  grupul de simetrie al cristalului ori coincide cu grupul de simetrie al propriet ții, ori este un subgrup al acestuia

$$G_{\text{al propriet ții}} \supseteq G_{\text{al cristalului}} \quad (25.1)$$

Relația (25.1) trebuie s  fie satisf cut  de grupul de simetrie al oric rei propriet ți a unui cristal. Dac  se consider  un set suficient de larg de diferite propriet ți ale unui cristal dat, atunci singurele elemente de simetrie comune tuturor propriet ților care intr   n acest set, f r  excepție, s nt elemente de simetrie ale grupului punctual al cristalului. Rezult  deci c  grupul punctual al unui cristal este de fapt intersecția (partea comun ) grupurilor de simetrie ale tuturor propriet ților posibile ale acestui cristal (Minnigerode, 1887). Kopt k (1960) a studiat seturile minime de propriet ți, dup  a c ror simetrie se definește univoc grupul punctual de simetrie a cristalului.

Simetria suprafețelor. Din principiul Neumann rezult  c  toate elementele de simetrie ale grupului punctual al unui cristal

*  n cunoscutul manual al lui Nye (1967) principiul lui Neumann este denumit „postulatul fundamental al fizicii cristalelor”; aici a fost dedus din principiul Curie  i constituie deci o teorem , nu un postulat.  n calitate de postulat, prefer m s  consider m nu principiul lui Neumann, ci afirmația mai general  — principiul Curie. Acesta  ns  nu poate fi numit postulat al fizicii cristalelor, deoarece domeniul lui de aplicare este mult mai larg.

constituie totodată elemente de simetrie ale suprafeței oricăreia dintre proprietățile acelui cristal. Totuși suprafața unei proprietăți poate avea și elemente de simetrie pe care cristalul nu le are; în particular, simetria suprafețelor proprietăților este adesea caracterizată de grupurile limită Curie. Așa sînt, de pildă, suprafețele coeficientului de dilatare termică a cristalelor din sistemele trigonal și tetragonal (fig. 24.3) — grupurile de simetrie ale cristalelor, $3m$, $\bar{3}m$, $\bar{4}2m$, sînt de fapt subgrupuri ale grupului de simetrie al suprafeței, ∞/mm . Aceeași simetrie o au și suprafețele întinderii și torsiunii, reprezentate în figura 24.6, simetria cristalelor fiind $6/mmm$ și $6mm$. Simetria suprafeței coeficientului de întindere al safirului (fig. 24.8), $\bar{3}m$, coincide cu simetria cristalului; la fel este și simetria suprafețelor coeficienților de întindere și de torsiune ale cuarțului (fig. 24.9 — 24.11), cu toate că grupul de simetrie al cristalului este mai mic, și anume 32. Simetria mmm a suprafețelor coeficientului de dilatare termică al aragonitului, clasa mmm (fig. 24.1), și al sării Seignette, clasa 222 (fig. 24.2), coincide cu simetria primului dintre cristale și este mai mare decît simetria celui de al doilea. Subliniem faptul că, coincidența dintre simetriile figurilor nu înseamnă nicidecum o identificare între formele lor: astfel, suprafețele modulului Young ale aurului și aluminiului (fig. 24.4, *a*, *b*), magneziului și zincului (fig. 24.4, *c*, *d*), ale coeficientului de dilatare termică al turmalinei și dihidrofosfatului de amoniu (fig. 24.3, *b*, *d*) avînd toate aceeași simetrie, se deosebesc foarte mult ca formă; dimpotrivă, suprafața coeficientului de întindere al safirului (fig. 24.8) este suficient de apropiată ca formă de suprafața coeficientului de torsiune al zincului (fig. 24.6, *a*), cu toate că fiecare are un alt grup de simetrie, $\bar{3}m$ și ∞/mm .

Simetria röntgenogramelor. Cu toate că formarea röntgenogramei unui cristal este determinată de difracția radiațiilor Röntgen pe densitatea periodică a electronilor în spațiu, simetria unei röntgenograme, în concordanță cu principiul Neumann, este definită nu de grupul spațial, ci de grupul punctual al cristalului. În afară de aceasta, simetria figurii de difracție nu depinde de faptul că cristalul are, sau nu, un centru de simetrie. Datorită acestui fapt, simetria unei röntgenograme nu este determinată nici măcar de grupul punctual, ci de grupul sau clasa de difracție Laue — care este o clasă de simetrie centrală mai înaltă a subsistemului în care este cuprins cristalul considerat (vezi § 6). Aplicînd principiul Curie, conchidem de aici că grupul de simetrie al unei röntgenograme, $G_{r\ddot{o}n}$, nu poate fi mai mic decît intersecția grupului de difracție al cristalului, G_L , cu grupul punctual al plăcii fotografice (sau al peliculei foto) $G_{pl} = \infty m$ (axa este perpendiculară pe



planul plăcii fotografice — simetria unui fascicul de radiații Röntgen care cad perpendicular pe placa fotografică este caracterizată de asemenea de grupul G_{pl})

$$G_{r\ddot{o}n} \supseteq G_L \cap \infty m; \quad (25.2)$$

găsind intersecția dintre aceste grupuri, este necesar să se țină seama de poziția reciprocă a elementelor lor de simetrie. Aici clasa Laue este

$$G_L = \begin{cases} G, & \text{dacă cristalul are simetrie centrală,} \\ G + \bar{I}G, & \text{dacă cristalul nu are simetrie centrală.} \end{cases} \quad (25.3)$$

În acest fel, după simetria röntgenogramelor se determină numai clasa Laue a cristalului, iar grupul lui spațial se deduce nu din simetria röntgenogramei, ci din lipsa reflexiilor pe unele, sau altele, dintre planurile cristalografice — din „extincțiile” caracteristice.

Rolul categoriilor în fizica cristalelor. Cea mai simplă și mai grosieră clasificare a cristalelor este împărțirea lor în trei categorii: superioară, medie și inferioară (vezi § 4). Grupurile punctuale ale tuturor claselor categoriei inferioare sînt subgrupuri ale grupului mmm , ale categoriei medii — subgrupuri ale grupului ∞/m , ale categoriei superioare — subgrupuri ale grupului $\infty\infty m$. Însă grupurile mmm , ∞/m și $\infty\infty m$ sînt grupurile posibile de simetrie ale tensorului simetric de rangul doi (vezi § 22). Dacă cristalele se subîmpart în categorii după simetria unei anumite proprietăți, atunci ar fi normal ca această proprietate să fie descrisă de un tensor simetric de rangul doi. Astfel de proprietăți sînt foarte numeroase; de exemplu, caracterul dublei refracții a luminii, particularitățile dilatării termice, ale permitivității dielectrice și permeabilității magnetice, ale conductibilității electrice și conductibilității termice a cristalelor sînt determinate tocmai de categoria căreia îi aparține cristalul considerat. Toate aceste proprietăți sînt într-adevăr exprimate prin tensori simetrici de rangul doi (vezi, de exemplu, § 27).

Prin subîmpărțirea cristalelor în categorii este definit caracterul anizotropiei acelor proprietăți care se exprimă printr-un tensor simetric de rangul doi: cristalele din categoria superioară sînt izotrope față de aceste proprietăți (grupul $\infty\infty m$), cristalele din categoria medie sînt, din punctul de vedere al anizotropiei acestor proprietăți, asemenea texturilor (grupul ∞/m) și numai în cristalele categoriei inferioare anizotropia acestor proprietăți este într-adevăr caracterizată de grupul cristalografic mmm .

Pe de altă parte, dacă simetria unei proprietăți nu se reduce la cele trei grupuri enumerate mai sus, se poate afirma că proprietatea respectivă, dacă se exprimă totuși printr-un tensor, acesta va fi mult mai complicat. Faptul că unele suprafețe ale proprietăților elastice ale cristalelor au simetria $m\bar{3}m$ (fig. 24.4, *a*, *b* și 24.7), iar altele, simetria $\bar{3}m$ (fig. 24.8, 24.9, 24.11), constituie o dovadă a faptului că proprietățile elastice ale cristalelor nu pot fi descrise de tensorii simetriei de rangul doi; și, într-adevăr, ele sînt exprimate prin tensori de rangul patru (vezi §§ 51, 52).

Disimetria necesară pentru apariția dublei refracții. Cea de a doua afirmație a principiului Curie susține că orice disimetrie depistată în orice fenomen trebuie să fie conținută și în cauzele care au produs-o. Fenomenele disimetrice pot avea loc numai în medii suficient de disimetrice; disimetria respectivă sau este o caracteristică a mediului dat ca atare, sau este provocată de disimetria acțiunilor exterioare ce se exercită asupra lui.

Să examinăm, de pildă, dubla refracție a luminii în cristale. Pentru ca aceasta să fie posibilă, planul frontului de undă din cristal trebuie să fie suficient de disimetric: el trebuie să aibă cel puțin două direcții singulare reciproc perpendiculare, care să poată servi ca direcții de oscilație pentru undele luminoase, ce se propagă în această direcție. Pentru aceasta, grupul de simetrie al frontului de undă din cristal nu trebuie să fie mai mare decît mmm . Dar acest grup de simetrie reprezintă intersecția dintre grupul de simetrie al cristalului, G , și grupul de simetrie al planului, ∞/mm (axă ∞ perpendiculară la plan). Prin urmare, condiția de existență a dublei refracții are forma

$$G \cap \infty/mm \subseteq mmm, \quad (25.4)$$

în care axa ∞ coincide cu direcția de propagare a luminii.

Condiția (25.4) caracterizează disimetria necesară a planului frontului de undă dintr-un cristal pentru ca să existe dubla refracție: printre elementele de simetrie ale acestui plan nu trebuie să existe nici un element care nu intră în grupul mmm . Elementele de simetrie care intră în grupul mmm sînt însă indiferente față de dubla refracție: dubla refracție poate avea loc independent de faptul dacă aceste elemente de simetrie există sau nu. Deci grupul de simetrie mmm definește aici tocmai această disimetrie. Din condiția (25.4) rezultă, în particular, că în cazul propagării undei după o axă de simetrie de ordinul trei sau de un ordin mai mare, nu se va observa dubla refracție; într-adevăr, o asemenea axă se va include în intersecția $G \cap \infty/mm$, care, din această cauză, nu va mai face parte din grupul mmm . Condiția (25.4) este necesară, dar nici pe departe și suficientă: astfel, în crista-



lele sistemului cubic dubla refracție nu se observă, chiar în cazurile în care direcția de propagare a luminii satisface această condiție.

Dacă mediul în care se propagă lumina nu posedă ca atare disimetria necesară pentru dubla refracție, el poate fi făcut disimetric supunându-l unor acțiuni suficient de disimetrice. Astfel, de exemplu, corpurile izotrope, transparente, și cristalele sistemului cubic devin birefringente sub acțiunea întinderii mecanice uniaxiale (efectul piezooptic) sau sub acțiunea unui câmp electric (efectul electrooptic) (vezi §§ 77, 78). Concluzia cea mai importantă care rezultă din exemplele examinate este conținută în următoarele cuvinte ale lui Pierre Curie: „Unele elemente de simetrie pot coexista cu anumite fenomene, ele nefiind însă necesare. Este necesar să lipsească anumite elemente de simetrie. Aceasta este tocmai acea disimetrie care dă naștere fenomenului” (P. Curie, 1966 p. 101).

§ 26. ECUAȚIILE FUNDAMENTALE ALE ELECTROSTATICII CRISTALELOR

Cîmpul electric într-un cristal, ca și în orice dielectric, este definit prin vectorul *intensitate a cîmpului electric*, E , și vectorul *polarizare*, P . Se utilizează, de asemenea, combinația liniară a acestor vectori — vectorul *inducție electrică*,

$$D = E + 4\pi P.$$

Ecuațiile fundamentale ale electrostaticii sînt

$$\operatorname{rot} E = 0, \quad (26.1)$$

$$\operatorname{div} D = 4\pi\rho, \quad (26.2)$$

ρ fiind densitatea sarcinilor libere, relații valabile în egală măsură atît dielectricilor izotropi cît și celor anizotropi. Din (26.1) rezultă existența *potențialului* φ al cîmpului electrostatic

$$E = -\operatorname{grad} \varphi. \quad (26.3)$$

În interiorul unui cristal, unde nu există sarcini libere,

$$\operatorname{div} D = 0. \quad (26.4)$$

Atît pe suprafața cristalelor cît și pentru suprafața de separație a dielectricilor, componenta tangențială $(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{E}$ a cîmpului $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ este continuă, pe cînd componenta normală $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}$ a cîmpului $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ suferă o discontinuitate egală cu $4\pi\rho_{\text{supr}}$, unde ρ_{supr} este densitatea de suprafață a sarcinilor libere, iar \mathbf{n} , vectorul unitar al normalei la suprafața cristalului. Continuitatea componentelor tangențiale, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, la trecerea prin suprafața de separație, corespunde continuității potențialului $\varphi(\mathbf{r})$ la trecerea prin această suprafață. Într-un cristal dielectric, în vecinătatea contactului cu un conductor

$$(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = -4\pi\rho_{\text{supr}}, \quad (26.5)$$

cîmpul în conductor fiind egal cu zero. La limita de separare a doi dielectrici componenta normală a inducției este continuă.

Toate relațiile folosite aici sînt aplicabile în aceeași măsură atît dielectricilor omogeni cît și celor neomogeni, atît dielectricilor izotropi cît și celor anizotropi. Proprietățile specifice ale unui anumit dielectric (omogenitatea sau neomogenitatea lui, izotropia sau anizotropia, caracteristicile dielectrice cantitative) apar exclusiv în evidență în expresia legăturii funcționale dintre \mathbf{D} , sau polarizarea \mathbf{P} și intensitatea cîmpului electric, \mathbf{E} .

Să examinăm, pentru a fixa ideile, legătura dintre \mathbf{P} și \mathbf{E} . În dielectricii izotropi acești vectori sînt proporționali

$$\mathbf{P} = \alpha\mathbf{E}, \quad (26.6)$$

unde α este *susceptibilitatea dielectrică* a mediului. Pentru generalizarea relației (26.6) și la mediile anizotrope, este important să ne dăm seama că în această formulă simplă sînt cuprinse două afirmații, complet diferite după natura lor logică.

1. Izotropia unui corp înseamnă că toate direcțiile din el sînt complet identice, atît timp cît corpului nu i se aplică un cîmp electric. Cînd însă corpul se află într-un cîmp electric, în fiecare volum elementar apare o aceeași direcție singulară unică — direcția vectorului intensitatea cîmpului \mathbf{E} . De aici rezultă că, dacă un corp izotrop se polarizează în cîmp electric, în fiecare volum elementar vectorul polarizare este paralel cu vectorul \mathbf{E} din același volum.

$$\mathbf{P} \parallel \mathbf{E}. \quad (26.7)$$

Din faptul că mediul este izotrop, rezultă, mai departe, că modulul P al vectorului \mathbf{P} depinde numai de modulul E al vectorului \mathbf{E} , dar nu și de direcția lui. Prin urmare,

$$P = f(E). \quad (26.8)$$

Formulele (26.7) și (26.8) sînt consecințele directe ale izotropiei mediului.

2. Pentru ca din (26.7) și (26.8) să rezulte formula (26.6) este necesară o afirmație suplimentară — anume că legătura funcțională, care nu este concretizată deloc în (26.8), se reduce la o proporționalitate directă

$$P = \alpha E. \quad (26.9)$$

Această egalitate nu rezultă din nici o lege fizică, ci înseamnă numai că în dezvoltarea funcției $P = f(E)$ după puterile lui E

$$P = P_0 + \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_{E=0} E + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial E^2} \right)_{E=0} E^2 + \dots \quad (26.10)$$

O precizie suficientă oferă termenul de gradul întâi în E (în absența cîmpului, toate direcțiile dintr-un corp izotrop sînt echivalente și deoarece prezența polarizării ar însemna existența unei direcții deosebite, rezultă că $P_0 = 0^*$). Comparînd (26.9) cu (26.10) obținem

$$\alpha = \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_{E=0}. \quad (26.11)$$

Desigur la extinderea relației dintre vectorii \mathbf{P} și \mathbf{E} asupra mediilor izotrope se poate utiliza ipoteza că această legătură este liniară; argumentul izotropiei mediului trebuie să fie înlocuit cu argumentul influenței simetriei cristalului asupra proprietăților lui dielectrice.

Dezvoltarea (26.10) pentru mediile anizotrope urmează, evident, să fie înlocuită cu dezvoltarea generală

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(0)} + \left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\mathbf{E}=0} \mathbf{E} + \dots, P_i = P_i^{(0)} + \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_k} \right)_{\mathbf{E}=0} E_k + \dots, \quad (26.12)$$

afirmații cu ajutorul cărora s-a stabilit că în dezvoltarea (26.10) termenul care nu depinde de E este nul, nemaifiind, în mediile

* Pentru seignettoelectrici (vezi § 65) această presupunere nu mai este valabilă nici pentru cîmpurile aplicate în mod obișnuit; pentru cîmpuri foarte intense, ea nu mai este în general adevărată (cum ar fi, de exemplu, cîmpul undei electromagnetice al emisiei laser). Însă în majoritatea cazurilor această aproximație liniară este complet suficientă, iar noi vom examina astfel de cazuri.

anizotrope, în general vorbind, aplicabile. Prin urmare, forma generală a dependenței liniare a polarizării \mathbf{P} de intensitatea cîmpului electric, \mathbf{E} , pentru mediile anizotrope, are forma

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(0)} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E}, \quad P_i = P_i^{(0)} + \alpha_{ik} E_k, \quad (26.13)$$

unde tensorul de rangul doi

$$\boldsymbol{\alpha} = \left(-\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{E}} \right)_{\mathbf{E}=0}, \quad \alpha_{ik} = \left(-\frac{\partial P_i}{\partial E_k} \right)_{\mathbf{E}=0} \quad (26.14)$$

se numește *tensorul susceptibilității dielectrice*, iar vectorul $\mathbf{P}^{(0)}$, *vectorul polarizare spontană* (adică de la sine). De aici se obține ușor și legătura dintre inducția electrică, $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, și intensitatea cîmpului electric, \mathbf{E} ,

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{(0)} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}, \quad D_i = D_i^{(0)} + \kappa_{ik} E_k, \quad (26.15)$$

unde tensorul de rangul doi

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{I} + 4\pi\boldsymbol{\alpha}, \quad \kappa_{ik} = \delta_{ik} + 4\pi\alpha_{ik} \quad (26.16)$$

se numește *tensorul permitivității dielectrice*, iar vectorul $\mathbf{D}^{(0)} = 4\pi\mathbf{P}^{(0)}$, *vectorul inducție electrică spontană*. Vectorul inducție se poate exprima și prin potențialul

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{(0)} - \boldsymbol{\kappa} \cdot \text{grad } \varphi, \quad D_i = D_i^{(0)} - \kappa_{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}. \quad (26.17)$$

În § 57 se va arăta că tensorul $\boldsymbol{\kappa}$ este simetric

$$\kappa_{ik} = \kappa_{ki}; \quad (26.18)$$

de unde rezultă că și tensorul $\boldsymbol{\alpha} = (1/4\pi)(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{I})$ este, de asemenea, simetric.

Să notăm o diferență esențială între tensorii examinați aici (printre tensori am inclus aici și vectorii, adică tensorii de rangul întâi) și anume: vectorii intensitate a cîmpului electric, \mathbf{E} , inducție, \mathbf{D} , polarizare, \mathbf{P} , caracterizează cîmpul electric din cristal; toți acești vectori variază cînd cîmpul se schimbă. Dimpotrivă, polarizarea spontană, $\mathbf{P}^{(0)}$, și inducția spontană, $\mathbf{D}^{(0)}$, precum și tensorii susceptibilitatea dielectrică, $\boldsymbol{\alpha}$, și permitivitatea dielec-

trică, κ , nu variază când câmpul electric din cristal se modifică: ei caracterizează proprietățile dielectrice ale cristalului ca atare, independent de mărimea și chiar de existența câmpului electric exterior, aplicat. Tensorii de primul tip se numesc *tensori de câmp*, deoarece ei caracterizează câmpul; tensorii de al doilea tip se numesc *tensori de material*, pentru că ei caracterizează materialul. În fizica mediilor izotrope și în cea a mediilor anizotrope tensorii de câmp se definesc la fel; toate deosebirile dintre fizica mediilor izotrope și fizica mediilor anizotrope sînt concentrate, dacă se poate spune așa, tocmai în tensorii de material.

§ 27. SIMETRIA PROPRIETĂȚILOR DIELECTRICE ALE CRISTALELOR

După cum s-a remarcat în § 26, cristalele anumitor clase pot să fie polarizate electric și în absența câmpului electric exterior; o astfel de polarizare se numește *polarizare spontană*, adică ea apare ca urmare a unor cauze interne, fără vreo cauză exterioară, cristalele cu o asemenea polarizare fiind numite *piroelectrice* (sensul acestui termen se va elucida în § 31). Să stabilim care sînt clasele cristalografice cărora le pot aparține cristalele piroelectrice. Polarizarea spontană este dată printr-un vector, adică simetria polarizării coincide cu simetria vectorului, fiind caracterizată de grupul limită ∞m . Conform principiului Neumann, grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor piroelectrice trebuie să fie subgrupuri ale acestui grup, astfel încît dintre toate elementele de simetrie pentru ele este permisă numai o singură axă de simetrie de orice ordin și planurile de simetrie ce trec prin ea. Dintre cele 32 de grupuri cristalografice și 7 grupuri punctuale limită, această condiție este satisfăcută numai de 10 grupuri cristalografice și de 2 grupuri limită:

1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$; ∞ , ∞m .

Cristalele și texturile celorlalte clase precum și mediile girotrope sau izotrope nu pot avea vectori ai polarizării spontane diferiți de zero, adică nu pot fi piroelectrice.

Dacă un cristal piroelectric are o axă sau un plan de simetrie, evident, vectorul polarizare spontană trebuie să fie orientat după această axă sau trebuie să se afle în acest plan. De aceea, în cristalele din clasa m , conform regulilor de alegere a sistemelor de coordonare cristalografice, vectorul polarizare spontană este

de forma

$$\mathbf{P}^{(0)} = P_1^{(0)} \mathbf{e}_1 + P_3^{(0)} \mathbf{e}_3,$$

iar cristalele clasei 2, de forma

$$\mathbf{P}^{(0)} = P^{(0)} \mathbf{e}_2,$$

în cristalele claselor 3, 4, 6, $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$ și în texturi, de forma

$$\mathbf{P}^{(0)} = P^{(0)} \mathbf{e}_3$$

(aici $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ sînt versorii axelor cristalografice corespunzătoare). Doar pentru cristalele din clasa 1 vectorul $\mathbf{P}^{(0)}$ are formă obișnuită în sistemul cristalografic de coordonate.

În cazul variației condițiilor exterioare, de exemplu, a temperaturii, vectorul polarizare spontană, de regulă, se modifică. Însă aceste variații sînt eventual limitate de simetria cristalului. În cristalele cu axă de simetrie, el va putea varia, evident, numai ca mărime, direcția sa coincidînd totdeauna cu direcția axei de simetrie și rămînînd, din această cauză, invariabilă. În cristalele din clasa m vectorul $\mathbf{P}^{(0)}$ își poate varia nu numai mărimea, ci și direcția, însă astfel încît să nu iasă din planul de simetrie.

Să examinăm influența simetriei cristalelor asupra susceptibilității lor dielectrice. Tensorul susceptibilității dielectrice, α , are, ca orice tensor simetric de rangul doi, trei valori proprii; dacă acestea sînt toate diferite între ele, atunci simetria tensorului este mmm , dacă două dintre ele coincid, simetria este ∞/mm , dacă toate cele trei coincid, simetria este $\infty\infty m$.

Să găsim care cristale pot avea tensorul α , astfel încît toate valorile sale proprii să fie diferite

$$\alpha = \alpha_{(1)} \mathbf{u}^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + \alpha_{(2)} \mathbf{u}^{(2)} \mathbf{u}^{(2)} + \alpha_{(3)} \mathbf{u}^{(3)} \mathbf{u}^{(3)}. \quad (27.1)$$

Grupurile punctuale de simetrie ale unor astfel de cristale sînt, conform principiului Neumann, fie subgrupuri ale grupului mmm , fie coincid cu acest grup. Această condiție este satisfăcută de toate cristalele categoriei inferioare și numai de ele.

Ceva mai complicată este problema analoagă pentru un tensor α , ale cărui două valori proprii coincid

$$\alpha = \alpha_{\perp} \mathbf{I} + (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}) \mathbf{k} \mathbf{k}. \quad (27.2)$$

Grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor al căror tensor al susceptibilității dielectrice are o structură de acest fel trebuie să fie subgrupuri ale grupului ∞/mm . Astfel de grupuri au cristalele din categoria medie și texturile. La ele două dintre valorile proprii ale tensorului α coincid în mod obligatoriu. Dealtfel, grupurile punctuale ale cristalelor din categoria inferioară sînt subgrupuri ale grupului ∞/mm : cu toate că tensorul susceptibilității dielectrice al acestor cristale poate avea trei valori proprii diferite, simetria cristalelor nu exclude cazul în care două dintre ele coincid. Tensorii de material depind de condițiile exterioare, de pildă, de temperatură. Chiar în cazul unui cristal din categoria inferioară, pentru o anumită temperatură, două valori proprii ale tensorului α coincid, nu există nici un motiv ca ambele să varieze la fel cu temperatura: tensorul de material avînd o simetrie de un grad atît de înalt nu este caracteristic unui cristal dat, în general, ci numai cristallului dat în condiții exterioare strict determinate. La cea mai mică variație a condițiilor exterioare tensorul își va pierde această simetrie. Prin urmare, în general, tensorul susceptibilității dielectrice al oricărui cristal din categoria inferioară are simetria mmm : numai pentru anumite cristale și în condiții exterioare, strict determinate, simetria se poate ridica pînă la ∞/mm .

Tensorul susceptibilității dielectrice, α , cu trei valori proprii care coincid, de forma

$$\alpha = \alpha \mathbf{I} \quad (27.3)$$

are simetria $\infty\infty m$. Un asemenea tensor al susceptibilității dielectrice de acest tip este caracteristic cristalelor ale căror grupuri de simetrie punctuale sînt subgrupuri ale grupului $\infty\infty m$, nefiind însă și subgrupuri ale grupului ∞/mm . Acestea sînt grupurile punctuale ale cristalelor din categoria superioară. Un tensor al susceptibilității dielectrice de același tip este propriu corpurilor izotrope și celor girotrope.

Substituind tensorul $\alpha = \alpha \mathbf{I}$ în relația (26.13) și observînd că vectorul polarizării spontane al tuturor cristalelor din categoria superioară, al corpurilor izotrope și al celor girotrope este identic egal cu zero, găsim

$$\mathbf{P} = \alpha \mathbf{I} \cdot \mathbf{E} = \alpha \mathbf{E}. \quad (27.4)$$

Deci dependența polarizării de intensitatea cîmpului electric în cazul cristalelor din categoria superioară este aceeași ca și în cazul corpurilor izotrope — susceptibilitatea lor dielectrică este izotropă.

Să studiem orientarea vectorilor proprii ai tensorului susceptibilității dielectrice față de un sistem de coordonate cristalofizic. Deoarece cristalele din sistemul triclinic nu au axe și planuri de simetrie, vectorii proprii ai tensorului nu trebuie să coincidă cu versorii sistemului de coordonate cristalofizic; dacă în cazul unor condiții exterioare determinate, unul dintre vectorii proprii coincide cu unul dintre versori, la orice modificare a condițiilor exterioare această coincidență, în general vorbind, va dispărea. De aceea, într-un sistem de coordonate cristalofizic tensorul susceptibilității dielectrice al unui cristal din sistemul triclinic are forma

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{vmatrix}. \quad (27.5)$$

Pentru cristalele din sistemul monoclinic, versorul e_2 este orientat după axa de ordinul doi sau după normala la planul de simetrie. Deoarece elementele de simetrie ale cristalului sînt în același timp și elementele de simetrie ale tensorului α , versorul e_2 trebuie să coincidă cu unul dintre vectorii proprii ai tensorului α , de pildă cu $u^{(2)}$. Astfel, într-un sistem de coordonate cristalofizic

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{31} \\ 0 & \alpha_{(2)} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{vmatrix}. \quad (27.6)$$

Toți versorii unui sistem de coordonate cristalofizic, pentru cristalele din sistemul rombic, sînt orientați după axele de simetrie de ordinul doi sau după normalele la planurile de simetrie. Conform principiului Neumann, tensorul susceptibilității dielectrice va avea aceleași axe și planuri de simetrie și, deci, acești versori coincid (cu exactitate de pînă la semn) cu vectorii proprii ai tensorului. Prin urmare,

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{vmatrix} \alpha_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{(3)} \end{vmatrix}. \quad (27.7)$$

Din principiul Neumann mai rezultă și că pentru cristalele din categoria medie și texturi, axa principală de simetrie coincide cu



axa tensorului dielectric; deoarece ea este orientată după e_3 ,

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{vmatrix} \alpha_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\parallel} \end{vmatrix}. \quad (27.8)$$

În sfârșit, tensorul susceptibilității dielectrice pentru cristalele cubice și corpurile izotrope are, în toate sistemele de coordonate carteziane, incluzînd, firește, și pe cel cristalofizic, o aceeași formă

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{vmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{vmatrix}. \quad (27.9)$$

Tensorul susceptibilității dielectrice, ca orice tensor de material, depinde de condițiile exterioare. Cînd ele se modifică, se modifică și valorile proprii ale tensorului, dar dacă simetria cristalului cere coincidența a două sau a tuturor celor trei valori proprii, ele vor continua să coincidă și în cazul condițiilor schimbate. Orientarea vectorilor proprii față de cristal, în cazul variației condițiilor exterioare, se modifică și ea, numai dacă direcțiile acestora nu sînt determinate de simetria cristalului. În cristalele triclinice schimbarea orientării vectorilor proprii nu este limitată în nici un fel de simetria cristalului. În cristalele monoclinice acela dintre vectorii proprii care este orientat după axa de simetrie sau după normala la planul de simetrie este imobil, iar ceilalți doi se rotesc, în cazul variației condițiilor exterioare, rămînînd perpendiculari pe acesta și perpendiculari între ei. În toate celelalte cristale și în toate texturile, orientarea tensorului susceptibilității dielectrice este determinată de simetrie și, prin urmare, nu se modifică în cazul unor condiții exterioare variabile.

Am examinat influența simetriei cristalului asupra tensorului susceptibilității dielectrice, α . Asupra tuturor celorlalți tensori simetrici de rangul doi, care exprimă proprietățile cristalelor, simetria cristalelor se manifestă exact în același fel. Totuși trebuie făcută o diferență netă între tensorii care descriu celelalte proprietăți (de exemplu, tensorul conductibilității termice, λ , vezi § 33) și alți tensori care descriu aceeași proprietate — tensorul susceptibilității dielectrice $\kappa = \mathbf{I} + 4\pi\alpha$ (tabelul 27.1) și tensorul insusceptibilității dielectrice, $\eta = \kappa^{-1}$. Toți tensorii simetrici de rangul doi, prin care se descriu proprietățile cristalelor triclinice și mono-

Tabelul 27.1

Valorile lui κ_{ij} (unități CGSes) pentru unele cristale

	Cristalele				Frecvența de măsurare
Categoria superioară	NaCl PbCl ₂ Diamant	5,90 33,5 5,68			10–10 ⁷ 5·10 ⁵ 1,6·10 ⁶
Categoria medie		κ_{33}	κ_{11}		
	Cuarț	4,27	4,34	3·10 ⁷	
	Safir	10,55	8,6	1·10 ³ – 3·10 ⁸	
	Calcit	8,0	8,5	1·10 ³	
	Rutil	200,0	86,4	1·10 ⁴	
	ADP	16,0	56,0	1·10 ³	
	KDP	20,0	44,0	10 ³ – 10 ⁸	
	CdS	10,3	9,3		
Categoria inferioară		κ_{11}	κ_{22}	κ_{33}	
	Sare				
	Seignette	205,0	9,6	9,5	
	Gips	9,9	5,1	5,0	3·10 ⁸

clinice sînt raportați la axele principale, pe cînd în cazul tensorilor α , κ , η aceste axe coincid, în cazul tensorului λ ele sînt diferite; dacă pentru un cristal oarecare, în condiții exterioare determinate nu mai este valabilă o simetrie înaltă a tensorului α , atunci este aceeași, în acest caz, și simetria tensorilor κ și η , simetria tensorului λ fiind însă normală. Această diferență se explică prin faptul că în cazul tensorilor, α , κ , η , vectorii proprii coincid, iar valorile proprii sînt legate prin relațiile

$$\kappa_{(i)} = 1 + 4\pi\alpha_{(i)}, \quad \eta_{(i)} = 1/\kappa_{(i)}, \quad (27.10)$$

pe cînd, în cazul tensorului λ vectorii proprii coincid cu vectorii proprii ai tensorului α numai în măsura în care această coincidență este dictată de simetria cristalului, valorile proprii nefiind, în general, legate în nici un fel, de valorile proprii ale tensorului α .

28. CRISTALUL ÎNTR-UN CÎMP ELECTRIC OMOGEN

Condensatorul cu dielectric anizotrop. Să introducem între armăturile unui condensator plan o placă cristalină de suprafață S și grosimea d ($d \ll \sqrt{S}$). Vom considera vectorul unitar n al nor-

malei la placă; componentele lui într-un sistem de coordonate cristalofizic sînt n_1, n_2, n_3 . Presupunînd că componentele tensorului permitivității dielectrice κ_{ij} sînt cunoscute în sistemul de coordonate cristalofizic, să determinăm capacitatea condensatorului, $C(n)$.

Deoarece suprafața plăcii este mult mai mare decît pătratul grosimii ei, deformarea cîmpului în apropierea marginilor plăcii poate fi neglijată, iar potențialul φ poate fi considerat că variază numai după grosimea plăcii. Vom lua originea pe una dintre suprafețele armăturii (să zicem, pe cea inferioară; vezi figura 28.1),

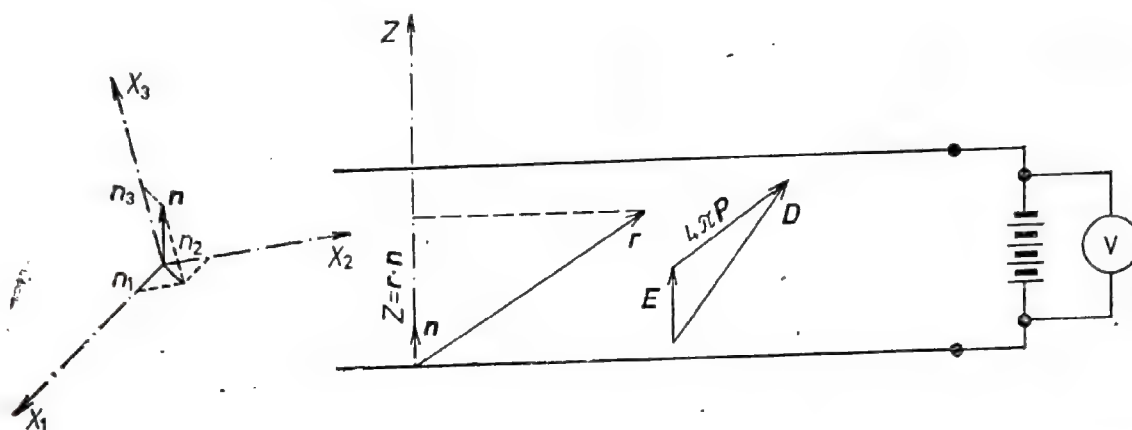


Fig. 28.1. Vectorii intensitate a cîmpului electric, inducție a cîmpului electric și polarizare electrică într-un condensator plan cu un dielectric anizotrop.

considerînd că vectorul n este orientat de la armătura inferioară spre cea superioară. Atunci distanța unui punct, r , față de planul inferior, va fi $z = r \cdot n$, iar $\varphi = \varphi(z)$. Intensitatea cîmpului electric este

$$E = -\text{grad } \varphi = -\frac{d\varphi}{dz} \frac{dz}{dr} = -\frac{d\varphi}{dz} n. \quad (28.1)$$

Atunci inducția va fi

$$D = -\frac{d\varphi}{dz} \kappa \cdot n, \quad D_i = -\frac{d\varphi}{dz} \kappa_{ik} n_k, \quad (28.2)$$

iar ecuația $\text{div } D = 0$ capătă forma

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = -\frac{d^2\varphi}{dz^2} n_i \kappa_{ik} n_k = 0, \quad -\frac{d^2\varphi}{dz^2} n \cdot \kappa \cdot n = 0, \quad (28.3)$$

sau, simplu,

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = 0.$$

Soluția generală a acestei ecuații este

$$\varphi(z) = Az + B.$$

Diferența de potențial pe armături este egală cu

$$U = \varphi(0) - \varphi(d),$$

astfel încît

$$\varphi(z) = - (U/d)z + \varphi(0), \quad (28.4)$$

$$\mathbf{E} = (U/d)\mathbf{n}, \quad E_k = (U/d)n_k, \quad (28.5)$$

$$\mathbf{D} = (U/d)\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n} \quad D_i = (U/d)\kappa_{ik} n_k. \quad (28.6)$$

Densitatea de suprafață a sarcinii pe armătura inferioară este

$$\rho_{\text{supr}} = (1/4\pi) \mathbf{n} \cdot \mathbf{D},$$

iar întreaga sarcină de pe armătură

$$Q = S \rho_{\text{supr}} = (SU/\pi d) n.$$

Prin urmare, capacitatea condensatorului este

$$C = Q/U = (S/4\pi d) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n} = (S/4\pi d) \kappa_{ik} n_i n_k. \quad (28.7)$$

Dacă se compară rezultatul obținut, cu formula capacității unui condensator cu dielectric izotrop,

$$C = (S/4\pi d) \kappa, \quad (28.8)$$

atunci se constată că rolul permitivității dielectrice, κ , îl are acum $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}$ — componenta normală a tensorului permitivității dielectrice după perpendiculară la planul plăcii; de aceea, $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}$ se numește uneori permitivitatea dielectrică a cristalului în direcția \mathbf{n} . Însă aceasta nu înseamnă nicidecum că în orice altă problemă de electrostatică a mediilor anizotrope se poate obține un rezultat



corect punind în soluția problemei izotrope corespunzătoare pe $n \cdot x \cdot n$ în locul lui x : în alte probleme, rolul permitivității dielectrice după o anumită direcție este jucat de cu totul alte mărimi.

Așa cum s-a arătat în § 21, cunoscând cele șase componente normale alese ale tensorului, luate în mod adecvat, se pot calcula toate componentele sale. Datorită acestui fapt, măsurând capacitatea condensatorilor care au șase moduri diferite de orientare a plăcilor tăiate dintr-un același cristal, se poate calcula tensorul permitivității dielectrice al cristalului respectiv, cele șase plăci fiind într-adevăr necesare numai în cazul cristalelor triclinice. Pentru calculul tensorului permitivității dielectrice a cristalelor monoclinice este suficient să se facă astfel de măsurători numai pe patru plăcuțe, pentru cristalele rombice, pe trei, pentru cristalele singoniei medii și pentru toate texturile posibile numai pe două și, în fine, pentru cristalele cubice, datorită izotropiei dielectrice a lor, numai pe o singură plăcuță orientată arbitrar.

Simetria cristalului permite, în anumite cazuri, să se simplifice substanțial formula (28.7) (vezi tab. 28.1).

Cristal cu inserția unui strat plan-paralel, în cîmp electric. Să tratăm următoarea problemă generală: într-un mediu anizotrop nemărginit, caracterizat prin tensorul permitivității dielectrice, $\kappa^{(e)}$, există un strat plan-paralel dintr-un alt material anizotrop cu tensorul permitivității dielectrice $\kappa^{(i)}$. Vom nota vectorul unitar al normalei la planul stratului intercalat, ca de obicei, cu n . Fie cîmpul electric din mediul omogen, $E^{(e)}$. Să găsim cîmpul $E^{(i)}$ din strat. Este natural să presupunem că și acesta este tot omogen. Atunci ecuațiile diferențiale ale electrostaticii vor fi satisfăcute identic, rămînînd deci să ne preocupăm numai de satisfacerea condițiilor la limită. Pentru ca vectorul E să satisfacă condițiile la limită, este necesar ca vectorii $E^{(e)}$ și $E^{(i)}$ să se deosebească între ei printr-un vector paralel cu normala n

$$E^{(i)} = E^{(e)} + An. \quad (28.9)$$

Constanta A , deocamdată necunoscută, va fi determinată din condițiile la limita pentru vectorul inducției. Inducția din mediu este

$$D^{(e)} = \kappa^{(e)} \cdot E^{(e)}, \quad (28.10)$$

iar din strat va fi

$$D^{(i)} = \kappa^{(i)} \cdot E^{(i)} = \kappa^{(i)} \cdot E^{(e)} + A\kappa^{(i)} \cdot n. \quad (28.11)$$

Tabelul 28.1

Componenta normală, $n \cdot \chi \cdot n$, a tensorului permitivității dielectrice, χ , exprimată prin componentele vectorului unitar, n , și prin indicii Miller (hkl) ai planului perpendicular la n

Sistemul triclinic, formulele generale

$$n \cdot \chi \cdot n = \chi_{ij} n_i n_j = \frac{\chi_{ij} E_i^\alpha E_j^\beta h_\alpha h_\beta}{g^{\gamma\delta} h_\gamma h_\delta}$$

Sistemul monoclinic ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$)

$$\begin{aligned} n \cdot \chi \cdot n &= \chi_{11} n_1^2 + \chi_{22} n_2^2 + \chi_{33} n_3^2 + 2\chi_{31} n_3 n_1 = \\ &= [h^2 b^2 c^2 \chi_{11} + k^2 c^2 a^2 \chi_{22} \sin^2 \beta + l^2 a^2 b^2 (\chi_{11} \cos^2 \beta + \chi_{33} \sin^2 \beta - \chi_{31} \sin 2\beta) - \\ &- 2lhab^2 c (\chi_{11} \cos \beta - \chi_{31} \sin \beta)] / (h^2 b^2 c^2 + k^2 c^2 a^2 \sin^2 \beta + l^2 a^2 b^2 - 2lhab^2 c \cos \beta) \end{aligned}$$

Sistemul rombic

$$n \cdot \chi \cdot n = \chi_{11} n_1^2 + \chi_{22} n_2^2 + \chi_{33} n_3^2 = \frac{h^2 b^2 c^2 \chi_{11} - k^2 c^2 a^2 \chi_{22} + l^2 a^2 b^2 \chi_{33}}{h^2 b^2 c^2 + k^2 c^2 a^2 + l^2 a^2 b^2}$$

Cristale din categoria medie și texturi

$$n \cdot \chi \cdot n = \chi_{11} (n_1^2 + n_2^2) + \chi_{33} n_3^2 = \chi_{11} + (\chi_{33} - \chi_{11}) n_3^2$$

Sistemul tetragonal

$$n \cdot \chi \cdot n = \frac{(h^2 + k^2) c^2 \chi_{11} + l^2 a^2 \chi_{33}}{(h^2 + k^2) c^2 + l^2 a^2}$$

Sistemele hexagonale și trigonale (în configurație hexagonală)

$$n \cdot \chi \cdot n = \frac{4(h^2 + k^2 + hk) c^2 \chi_{11} + 3l^2 a^2 \chi_{33}}{4(h^2 + k^2 + hk) c^2 + 3l^2 a^2}$$

Sistemul cubic și corpurile izotrope

$$n \cdot \chi \cdot n = \chi$$

Notățiile: h – indicii Miller ai planului, E_i^α – matricea care leagă versorii e_i ai sistemului de coordonate cristalofizice cu vectorii fundamentali, a_α , ai rețelei cristaline: $e_i = E_i^\alpha a_\alpha$; $g^{\gamma\delta}$ – componentele contravariante ale tensorului metric al rețelei; a, b, c, β – parametrii celulei.

Condițiile la limită pentru D cer ca

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{E}^{(e)} + A \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(e)} \cdot \mathbf{E}^{(e)}, \quad (28.12)$$

de unde găsim

$$A = \frac{\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\kappa}^{(e)} - \boldsymbol{\kappa}^{(t)}) \cdot \mathbf{E}^{(e)}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}} \quad (28.13)$$

și, în sfârșit,

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{E}^{(e)} + \frac{\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\kappa}^{(e)} - \boldsymbol{\kappa}^{(t)}) \cdot \mathbf{E}^{(e)}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{n}, \quad (28.14)$$

$$E_j^{(t)} = [\delta_{ji} + (1/\kappa_{pq}^{(t)} n_p n_q) n_j n_k (\kappa_{ki}^{(e)} - \kappa_{ki}^{(t)})] E_i^{(e)}.$$

Dacă, în particular cîmpul din mediu este perpendicular pe planul stratului intercalat, atunci și cîmpul din intercalație se bucură de această proprietate și este egal, după cum se poate calcula imediat, cu

$$\mathbf{E}^{(t)} = \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(e)} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{E}^{(e)} \mathbf{n} = \frac{\mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}^{(e)}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}}. \quad (28.15)$$

Să examinăm cele mai importante cazuri particulare, care se reduc la problema enunțată aici.

Lamelă anizotropă într-un cîmp electric omogen. Putem determina imediat cîmpul din lamela, cu ajutorul formulei (28.14), înlocuind în ea pe $\boldsymbol{\kappa}^{(e)}$ cu tensorul \mathbf{I}

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{E}^{(e)} - \frac{\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\kappa}^{(t)} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{E}^{(e)}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{n}. \quad (28.16)$$

În particular, pentru

$$\mathbf{E}^{(e)} = E^{(e)} \mathbf{n},$$

vom obține

$$\mathbf{E}^{(t)} = \frac{1}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa}^{(t)} \cdot \mathbf{n}} E^{(e)} \mathbf{n}. \quad (28.17)$$

Cavitate plan-paralelă într-un mediu anizotrop infinit. În acest caz $\kappa^{(t)} = \mathbf{I}$. Câmpul din cavitate este

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{E}^{(e)} + [\mathbf{n} \cdot (\kappa^{(e)} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{E}^{(e)}] \cdot \mathbf{n}. \quad (28.18)$$

Într-un corp izotrop, pentru $\mathbf{E}^{(0)} \parallel \mathbf{n}$, vectorul intensitate a câmpului din strat este egal cu vectorul inducție electrică în corp

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{D}^{(e)}.$$

Dacă corpul este anizotrop, această egalitate este satisfăcută numai dacă \mathbf{n} este vector propriu al tensorului $\kappa^{(e)}$, însă în cazul general vectorul

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}^{(e)}$$

este egal cu componenta vectorului inducție din corp, luată după \mathbf{n} , și nu va mai coincide cu vectorul $\mathbf{D}^{(e)}$, nici în modul, nici ca direcție.

Cînd vectorul $\mathbf{E}^{(e)}$ este paralel cu cavitatea ($\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}^{(e)} = 0$) intensitatea câmpului din corpul izotrop va fi egală cu intensitatea câmpului din cavitate, pe cînd în mediul anizotrop,

$$\mathbf{E}^{(t)} = \mathbf{E}^{(e)} + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}^{(e)}. \quad (28.19)$$

Termenul al doilea se anulează numai cu condiția ca vectorul \mathbf{n} să fie perpendicular atît pe vectorul $\mathbf{E}^{(e)}$, cît și pe vectorul $\mathbf{D}^{(e)}$, în particular cînd \mathbf{n} reprezintă unul dintre vectorii proprii ai tensorului $\kappa^{(e)}$.

Sfera anizotropă în câmp electric. Fie ca o sferă anizotropă de rază R , al cărei tensor al permitivității dielectrice este κ , să se afle în câmpul electric a cărui intensitate la distanță mare de sferă este $\mathbf{E}^{(0)}$. Se cere să se determine câmpul din interiorul și din afara sferei.

În câmp electric sfera se polarizează, dînd astfel naștere în spațiul înconjurător unui câmp suplimentar. Să presupunem că el coincide cu câmpul dipolului, momentul dipolar al sferei depinzînd liniar de $\mathbf{E}^{(0)}$

$$\mathbf{M} = R^3 \gamma \cdot \mathbf{E}^{(0)}, \quad (28.20)$$

unde tensorul γ depinde de κ , însă nu și de direcția vectorului $\mathbf{E}^{(0)}$, factorul R^3 fiind introdus din considerente dimensionale. Atunci potențialul câmpului din afara sferei va fi egal cu

$$\varphi^{(e)} = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}^{(0)} + (R/r)^3 \mathbf{r} \cdot \gamma \cdot \mathbf{E}^{(0)}. \quad (28.21)$$

Să mai presupunem că în interiorul sferei câmpul este omogen și că depinde liniar de $\mathbf{E}^{(0)}$; potențialul său este egal cu

$$\varphi^{(4)} = -\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^{(0)}, \quad (28.22)$$

unde tensorul $\boldsymbol{\beta}$, ca și $\boldsymbol{\gamma}$, depinde numai de $\boldsymbol{\kappa}$, însă nu și de direcția lui $\mathbf{E}^{(0)}$. Potențialele $\varphi^{(e)}$ și $\varphi^{(4)}$ satisfac ecuațiile electrostaticii, iar condițiile la limită permit determinarea tensorilor $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$. Astfel, din condiția de continuitate a potențialului de la suprafață, rezultă că

$$-\mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^{(0)} = -\mathbf{R} \cdot \mathbf{E}^{(0)} + \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{E}^{(0)},$$

\mathbf{R} fiind raza vectoare a unui punct de pe suprafața sferei. Înlocuind produsul scalar $\mathbf{R} \cdot \mathbf{E}^{(0)}$ prin expresia egală cu el, $\mathbf{R} \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{E}^{(0)}$, și trecând toți termenii în membrul stâng al ecuației, obținem

$$\mathbf{R} \cdot (\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\beta} - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{E}^{(0)} = 0.$$

Deoarece această egalitate rămâne valabilă pentru orice direcție posibilă a vectorilor \mathbf{R} și $\mathbf{E}^{(0)}$, tensorul din paranteză este egal cu zero, adică

$$\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{I}. \quad (28.23)$$

Din continuitatea componentelor normale ale vectorului inducție electrică, la limita de separație, rezultă

$$-\mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{E}^{(0)} = -2\mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{E}^{(0)} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{E}^{(0)}.$$

De aici, prin același procedeu, vom obține

$$\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{I}. \quad (28.24)$$

Soluția sistemului celor două ecuații liniare în tensorii $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$, (28.23) și (28.24), este de forma

$$\boldsymbol{\beta} = 3(\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1} \quad \boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{I}) \cdot (\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1}. \quad (28.25)$$

Acum nu mai prezintă nici o dificultate scrierea expresiei câmpului, atât în afara sferei cât și în interiorul ei, pe noi interesându-ne, însă, în mod special câmpul din interiorul sferei. Intensitatea lui este

$$\mathbf{E}^{(4)} = 3(\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{E}^{(0)}, \quad (28.26)$$

iar inducția satisface relația foarte interesantă

$$D^{(4)} = 3E^{(0)} - 2E^{(4)}, \quad (28.27)$$

care se deduce cu ajutorul următorului șir de relații

$$\begin{aligned} D^{(4)} &= \kappa \cdot E^{(4)} = 3\kappa \cdot (\kappa + 2I)^{-1} \cdot E^{(0)} = \\ &= 3[(\kappa + 2I) - 2I] \cdot (\kappa + 2I)^{-1} \cdot E^{(0)} = \\ &= [3I - 6(\kappa + 2I)^{-1}] \cdot E^{(0)} = 3E^{(0)} - 2E^{(4)}. \end{aligned}$$

§ 29. CÎMPUL ÎN INTERIORUL UNEI CAVITĂȚI SFERICE DINTR-UN MEDIU ANIZOTROP

În paragraful precedent am obținut o soluție relativ simplă pentru cazul în care o sferă anizotropă se află în vid și este dat cîmpul omogen departe de sferă. Problema, ce pare asemănătoare cu aceea în care într-un mediu anizotrop infinit există o cavitate sferică fiind dat un cîmp electric omogen, $E^{(0)}$, departe de sferă, este în realitate cu mult mai complicată. Vom prezenta, fără a face demonstrația, rezolvarea ei, avînd în vedere deosebită importanță pe care o prezintă această problemă pentru teoria microscopică a rețelei cristaline (pentru demonstrație vezi Landau și Lifșit, 1957, §§ 4, 8, 13; în ceea ce privește aplicarea acestei probleme în teoria microscopică a rețelei cristaline, vezi Born și Huang, 1958 și Kittel — 1962). Se constată că $E^{(4)}$, cîmpul din interiorul cavității, este și în acest caz tot omogen, însă dependența lui de $E^{(0)}$, chiar dacă rămîne liniară, este cu mult mai complicată.

Înainte de a transcrie soluția acestei probleme, să analizăm, plecînd de la principiul Curie, tensorul S ca funcție de un tensor simetric de rangul doi, T . Așa cum s-a arătat în § 22, un tensor simetric de rangul doi T este totdeauna invariant în raport cu grupul mmm . Din principiul Curie rezultă că tensorul S este invariant, într-o măsură mai mică, în raport cu același grup. Însă, de oarece vectorii proprii ai unui tensor sînt orientați după axele de simetrie ale acestui tensor, din principiul Curie rezultă că vectorii proprii ai tensorului funcție coincid cu vectorii proprii ai

tensorului-argument*. De aici rezultă clar că toți tensorii care sînt funcții de un tensor simetric de rangul doi, se reduc la forma diagonală în același sistem de coordonate ca și tensorul-argument. Se spune că $S = f(T)$ dacă în acest sistem

$$\|S\| = \begin{vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} f(T_{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & f(T_{(2)}) & 0 \\ 0 & 0 & f(T_{(3)}) \end{vmatrix}.$$

În particular, $S = \sqrt{T}$, dacă $S_{(i)} = \sqrt{T_{(i)}}$. În acest fel pot fi considerate chiar și funcționalele unui tensor; este necesar numai ca în întregul domeniu de variație a tensorului-funcție, sistemul său de coordonate proprii să rămână neschimbat.

Să ne întoarcem acum la problema enunțată la începutul acestui paragraf. Fie κ tensorul coeficienților permitivității dielectrice a mediului anizotrop, iar $\eta = \kappa^{-1}$, tensorul coeficienților impermitivității dielectrice a acestuia. Vom trece acum la investigarea tensorilor $\mu = \sqrt{\kappa}$ și $\nu = \sqrt{\eta}$, precum și a tensorului coeficienților depolarizării

$$N = \frac{1}{2} \sqrt{\det \eta} \int_0^\infty \frac{(\eta + zI)^{-1} dz}{\sqrt{\det (\eta + zI)}}. \quad (29.1)$$

Atunci $E^{(i)}$ din cavitate este omogen și depinde de cîmpul la distanță de cavitate, $E^{(0)}$, în felul următor

$$E^{(i)} = [I - \nu \cdot N \cdot (I - \eta) \cdot \mu]^{-1} \cdot E^{(0)}. \quad (29.2)$$

În sistemul propriu de coordonate formulele (29.1) și (29.2) se simplifică substanțial. Din formula (29.2) dispar valorile proprii ale tensorilor μ și ν (ele se reduc pur și simplu), această formulă capătă forma

$$E_k^{(i)} = \frac{E_k^{(0)}}{1 - N_{(k)} (1 - \eta_{(k)})}. \quad (29.3)$$

* În afară de aceasta, din principiul Curie rezultă că un tensor-funcție este simetric în raport cu indicul dacă tensorul-argument are aceeași proprietate. Chestiunea este că, dacă un tensor de rangul doi este esențial nesimetric în raport cu indicul, adică nu este egal cu tensorul transpus în raport cu el, în grupul său de simetrie cu bunăștiință lipsesc unele operații care intră în grupul *mmm*.

Pentru valorile proprii ale tensorului coeficienților depolarizării, din (29.1), obținem

$$N_{(k)} = \frac{1}{2} \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \int_0^\infty \frac{dz}{(\eta_{(k)} + z) \sqrt{\det (\boldsymbol{\eta} + z\mathbf{I})}}. \quad (29.4)$$

Integrala din această formulă este o integrală eliptică; ea se exprimă prin cunoscutele *integrale eliptice de speța întâi* și de speța a doua, $F(\varphi, k)$ și $E(\varphi, k)$ *. Presupunând totuși că $\eta_{(1)} > \eta_{(2)} > \eta_{(3)}$ și notînd

$$\varphi = \arcsin \sqrt{\frac{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}{\eta_{(1)}}}, \quad k = \sqrt{\frac{\eta_{(1)} - \eta_{(2)}}{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}},$$

avem

$$N_{(1)} = \frac{\sqrt{\eta_{(1)} \eta_{(2)} \eta_{(3)}}}{(\eta_{(1)} - \eta_{(2)}) \sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}} [F(\varphi, k) - E(\varphi, k)], \quad (29.5, a)$$

$$N_{(2)} = \frac{\sqrt{\eta_{(1)} \eta_{(2)} \eta_{(3)}}}{\eta_{(1)} - \eta_{(2)}} \left[\frac{\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}} E(\varphi, k) - \frac{1}{\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}} F(\varphi, k) \right] - \frac{\eta_{(3)}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}}, \quad (29.5, b)$$

$$N_{(3)} = \frac{\eta_{(2)}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}} - \frac{\sqrt{\eta_{(1)} \eta_{(2)} \eta_{(3)}}}{(\eta_{(2)} - \eta_{(3)}) \sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}} E(\varphi, k). \quad (29.5, c)$$

* Prin definiție, integrala eliptică de speța întâi este

$$F(\varphi, k) = \int_0^\varphi \frac{d\psi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi}},$$

iar integrala eliptică de speța a doua este

$$E(\varphi, k) = \int_0^\varphi \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi} \, d\psi.$$

Valorile acestor integrale ca funcții de φ și de k sînt, de exemplu, în Ianke, Emde și Lösche (1968).

Adunînd valorile proprii ale tensorului coeficienților depolarizării obținem

$$N_{\parallel} = 1. \quad (29.6)$$

Pentru cristalele din categoria medie, cînd două dintre valorile proprii ale tensorului coeficienților impermitivității dielectrice coincid, integralele (29.5) se exprimă prin funcții elementare. Aici trebuie deosebite două cazuri. Dacă $\eta_{\parallel} > \eta_{\perp}$, atunci, notînd

$$e = \sin \varphi = \sqrt{\frac{\eta_{\parallel} - \eta_{\perp}}{\eta_{\parallel}}},$$

obținem

$$N_{\parallel} = 1 - \frac{1}{2e^3} \left[2e - (1 - e^2) \ln \frac{1+e}{1-e} \right], \quad (29.7)$$

$$N_{\perp} = \frac{1}{4e^3} \left[2e - (1 - e^2) \ln \frac{1+e}{1-e} \right].$$

Dacă însă $\eta_{\perp} > \eta_{\parallel}$ notăm

$$f = \sqrt{\frac{\eta_{\perp} - \eta_{\parallel}}{\eta_{\parallel}}},$$

și atunci

$$N_{\parallel} = 1 - \frac{1}{f^3} (\operatorname{arctg} f - f), \quad N_{\perp} = \frac{1}{2f^3} (\operatorname{arctg} f - f). \quad (29.8)$$

Formulele (29.7) și (29.8) se mai pot simplifica dacă anizotropia proprietăților dielectrice ale cristalului este slabă. Anume, dacă $e \ll 1$, relațiile (29.7) pot fi scrise aproximativ sub forma

$$N_{\parallel} = \frac{1}{3} - \frac{2}{15} e^2, \quad N_{\perp} = \frac{1}{3} + \frac{1}{15} e^2, \quad (29.9)$$

iar formulele (29.8), pentru $f \ll 1$ se vor scrie sub forma

$$N_{\parallel} = \frac{1}{3} + \frac{2}{15} f^2, \quad N_{\perp} = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} f^2. \quad (29.10)$$

Pentru cristalele din sistemul cubic și pentru corpurile izotrope, din (29.6) obținem

$$N = \frac{1}{3} N_{ii} = \frac{1}{3}. \quad (29.11)$$

Utilizând acum relația (29.2), găsim

$$E^{(1)} = \frac{3\kappa}{2\kappa + 1} E^{(0)}; \quad (29.12)$$

a acest rezultat arhicunoscut se putea ajunge, firește, pe o cale complet elementară.

§ 30. CÎMPURILE SARCINII PUNCTUALE ȘI DIPOLULUI ÎNTR-UN MEDIU ANIZOTROP

Să studiem câmpul unei sarcini punctuale, e , într-un mediu anizotrop, caracterizat de tensorul permitivității dielectrice, κ . Funcția de densitate a sarcinilor electrice, $\rho(\mathbf{r})$, pentru o sarcină punctuală se reduce, după cum se știe, la funcția δ a lui Dirac, înmulțită cu mărimea sarcinii

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(0)}),$$

unde vectorul $\mathbf{r}^{(0)}$ determină poziția sarcinii. Luând originea axelor de coordonate în sarcina punctuală,

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi e\delta(\mathbf{r}). \quad (30.1)$$

Deoarece

$$\mathbf{D} = -\kappa \cdot \operatorname{grad} \varphi$$

iar tensorul κ nu depinde de coordonate, din (30.1) rezultă că potențialul φ satisface ecuația

$$\kappa_{ij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} = -4\pi e\delta(\mathbf{r}). \quad (30.2)$$

Să scriem această ecuație în sistemul de coordonate $X_1 X_2 X_3$, construit pe vectorii proprii ai tensorului κ :

$$\kappa_{(1)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \kappa_{(2)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \kappa_{(3)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = -4\pi e \delta(x_1) \delta(x_2) \delta(x_3). \quad (30.3)$$

Pentru a rezolva ecuația (30.3) să facem o substituție de variabilă : în locul variabilelor x_i vom introduce variabilele $y_i = x_i / \sqrt{\kappa_{(i)}}$. Folosind, pentru transformarea funcției δ , formula $\delta(\kappa^{1/2} y) = \kappa^{-1/2} \delta(y)$ obținem din (30.3)

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_3^2} = - \frac{4\pi e}{\sqrt{\kappa_{(1)} \kappa_{(2)} \kappa_{(3)}}} \delta(y_1) \delta(y_2) \delta(y_3). \quad (30.4)$$

Această ecuație determină potențialul câmpului sarcinii punctuale

$$e' = e / \sqrt{\kappa_{(1)} \kappa_{(2)} \kappa_{(3)}}$$

în vid ; soluția ei va fi

$$\varphi = e' / \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}.$$

În variabilele inițiale,

$$\varphi = \frac{e}{\sqrt{\kappa_{(1)} \kappa_{(2)} \kappa_{(3)}}} \left(\frac{x_1^2}{\kappa_{(1)}} + \frac{x_2^2}{\kappa_{(2)}} + \frac{x_3^2}{\kappa_{(3)}} \right)^{-1/2}.$$

Să considerăm tensorul impermitivității dielectrice, $\eta = \kappa^{-1}$. Observînd că

$$\kappa_{(1)} \kappa_{(2)} \kappa_{(3)} = \det \kappa = 1 / \det \eta$$

iar

$$\frac{x_1^2}{\kappa_{(1)}} + \frac{x_2^2}{\kappa_{(2)}} + \frac{x_3^2}{\kappa_{(3)}} = \eta_{(1)} x_1^2 + \eta_{(2)} x_2^2 + \eta_{(3)} x_3^2 = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r},$$

vom scrie potențialul câmpului sarcinii electrice punctuale, e , într-un mediu anizotrop sub forma fără coordonate

$$\varphi = e \sqrt{\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}}}. \quad (30.5)$$

Ecuatia

$$\varphi(\mathbf{r}) = \text{const}$$

definește suprafețele echipotențiale. Din soluția lui (30.5) rezultă că aceștia sînt niște elipsoizi

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} = \text{const} \quad (30.6)$$

și sînt caracteristici tensorului impermitivității dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$ (vezi § 22).

Exprimînd raza vectoare, \mathbf{r} , sub forma $\mathbf{r} = r\mathbf{p}$, unde r este distanța de la originea axelor de coordonate, iar \mathbf{p} este vectorul unitar al razei, se poate scrie, în loc de (30.5),

$$\varphi = e \sqrt{\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}}} \frac{1}{r}. \quad (30.7)$$

Compararea acestei formule cu formula analoagă pentru mediul izotrop, $\varphi = e/(\kappa r)$, arată că rolul de „permitivitate dielectrică în direcția vectorului unitar \mathbf{p} ” îl are, în această problemă, mărimea

$$\kappa^{(\varphi)}(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}}{\det \boldsymbol{\eta}}}. \quad (30.8)$$

Cunoscînd potențialul, se poate obține imediat intensitatea

$$\mathbf{E} = - \text{grad } \varphi = \frac{e \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}}}{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r})^{3/2}} \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} \quad (30.9)$$

și inducția cîmpului electric

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E} = \frac{e \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}}}{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r})^{3/2}} \mathbf{r}; \quad (30.10)$$

calculînd inducția, am utilizat faptul că tensorii $\boldsymbol{\eta}$ și $\boldsymbol{\kappa}$ sînt inversul unuia față de celălalt.

Vectorii inducție electrică, \mathbf{D} , atît într-un mediu anizotrop, cît și într-unul izotrop, sînt orientați după razele care pleacă din sarcină. Vectorii intensitate a cîmpului electric, \mathbf{E} , dintr-un mediu anizotrop, în general vorbind, se abat de la aceste raze. Totodată de-a lungul fiecăreia dintre aceste raze, mărimea absolută a inten-

sității descrește după aceeași lege, $E(r) \sim 1/r^2$, ca și într-un mediu izotrop

$$E = \frac{e \sqrt{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p} \det \boldsymbol{\eta}}}{(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p})^{3/2}} \frac{1}{r^2}. \quad (30.11)$$

Compararea acestei formule cu formula analoagă pentru mediul izotrop, $E = e/(\chi r^2)$, permite să se mai introducă încă o „permitivitate dielectrică în direcția vectorului unitar \mathbf{p} ”

$$\chi^{(E)}(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p})^3}{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p} \det \boldsymbol{\eta}}}. \quad (30.12)$$

Prin urmare, se poate introduce o mulțime de definiții diferite ale „permitivității dielectrice într-o anumită direcție”; din această cauză, este necesar să se precizeze clar, despre care anume mărime este vorba, în fiecare caz în parte.

Generalizarea directă a problemei câmpului sarcinii punctuale este reprezentată de problema câmpului dipolului. Să examinăm un sistem de sarcini punctuale, e_n , care se află în punctele $\mathbf{r}^{(n)}$. Potențialul câmpului unui asemenea sistem este egal cu suma potențialelor fiecărei sarcini punctuale în parte, adică

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_n e_n \sqrt{\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(n)}) \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(n)})}}. \quad (30.13)$$

Să analizăm câmpul departe de sarcini. În acest caz, este convenabil să se presupună că originea coordonatelor este luată undeva în vecinătatea sarcinilor, astfel încât punctul de observație va fi considerat departe de sarcini când $r \gg r^{(n)}$. Să dezvoltăm (30.13) în serie, păstrînd primii doi termeni. Deoarece

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(n)}) \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(n)}) &\approx \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{r}^{(n)} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}^{(n)} = \\ &= \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} \left(1 - \frac{2\mathbf{r}^{(n)} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}}{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}} \right) \end{aligned}$$

(aici s-a folosit faptul că tensorul $\boldsymbol{\eta}$ este simetric), iar pentru $\epsilon \ll 1$ sînt valabile egalitățile aproximative

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2\epsilon}} \approx \frac{1}{1 - \epsilon} \approx 1 + \epsilon,$$

atunci din (30.13) obținem

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}}} \sum_n e_n \left(1 + \frac{\mathbf{r}^{(n)} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}}{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}} + \dots \right), \quad (30.14)$$

Primul termen al acestei dezvoltări este potențialul câmpului sarcinii totale, $e = \sum_n e_n$. Pe noi ne interesează câmpul unui sistem de sarcini neutru ca întreg, când $e = 0$, fiind diferit de zero următorul termen al dezvoltării. Atunci câmpul este definit în primul rând cu ajutorul momentului dipolar

$$\mathbf{M} = \sum_n e_n \mathbf{r}^{(n)} \quad (30.15)$$

al sistemului de sarcini, potențialul lui fiind

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}}{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r})^{3/2}}. \quad (30.16)$$

Intensitatea câmpului este

$$\mathbf{E} = \text{grad } \varphi = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{3(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}) \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}) \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{M}}{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r})^{5/2}}, \quad (30.17)$$

iar inducția

$$\mathbf{D} = \kappa \cdot \mathbf{E} = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{3(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r} - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{M}}{(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r})^{5/2}}, \quad (30.18)$$

Pentru a separa în aceste formule dependențele de direcție pe de o parte, de dependența de distanța dintre punctul de observație și dipol pe de alta, folosim, din nou, vectorul unitar al razei, \mathbf{p} ,

$$\varphi = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}}{(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p})^{3/2}} \frac{1}{r^2}, \quad (30.19)$$

$$\mathbf{E} = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{3(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p} - (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{M}}{(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p})^{5/2}} \frac{1}{r^3}, \quad (30.20)$$

$$\mathbf{D} = \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \frac{3(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} - (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{M}}{(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p})^{5/2}} \frac{1}{r^3}. \quad (30.21)$$

Într-un mediu izotrop singurul plan dintre suprafețele echi-potențiale este planul care trece prin dipol, fiind totodată perpendicular la vectorul momentului dipolar, \mathbf{M} . În mediul anizotrop, un rol analog îl joacă planul care trece, de asemenea, prin dipol, însă este perpendicular nu pe vectorul \mathbf{M} , ci pe vectorul $\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{M}$. Într-un mediu izotrop, în toate punctele care se află pe axa dipolului ($\mathbf{p} \parallel \mathbf{M}$), vectorii \mathbf{E} și \mathbf{D} sînt orientați după aceeași axă ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{D} \parallel \mathbf{M}$). Într-un mediu anizotrop, în aceste puncte numai vectorul \mathbf{D} este orientat după axa dipolului, vectorul \mathbf{E} fiind paralel cu vectorul $\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{M}$. În mediul anizotrop descreșterea potențialului și a valorilor absolute ale vectorilor cîmpului odată cu îndepărtarea de dipol, după oricare dintre raze, este aceeași ca și într-un mediu izotrop: potențialul scade ca $1/r^2$, intensitatea și inducția, ca $1/r^3$.

31. PIROELECTRICII

Se numesc *cristale piroelectrice* cristalele caracterizate prin faptul că vectorul polarizării spontane, $\mathbf{P}^{(0)}$, sau al inducției spontane, $\mathbf{D}^{(0)} = 4\pi \mathbf{P}^{(0)}$, este diferit de zero. Ecuația de material a electrostaticii, pentru cristalele piroelectrice

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{(0)} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}, \quad (31.1)$$

împreună cu ecuațiile electrostaticii și condițiile la limită, permit să se explice comportarea acestor cristale în absența cîmpurilor exterioare. Să examinăm, de pildă, o sferă de rază R , dintr-un cristal piroelectric; vom utiliza în acest scop, ca și în problema sferei cristaline din § 28, tensorii nedeterminați β și γ , care depind numai de $\boldsymbol{\kappa}$. Este firesc să ne așteptăm ca momentul dipolar al sferei să fie egal cu

$$\mathbf{M} = R^3 \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{D}^{(0)}, \quad (31.2)$$

cîmpul în exteriorul sferei fiind determinat de acest moment dipolar, așa că potențialul lui este

$$\varphi^{(e)} = (R/r)^3 \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{D}^{(0)}, \quad (31.3)$$

cîmpul din interiorul sferei fiind omogen

$$\varphi^{(i)} = - \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{D}^{(0)}. \quad (31.4)$$

Din condițiile la limită obținem

$$\mathbf{R} \cdot (\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\gamma}) \cdot \mathbf{D}^{(0)} = 0, \quad (31.5)$$

$$\mathbf{R} \cdot (\boldsymbol{\kappa} \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{D}^{(0)} = 0, \quad (31.6)$$

unde \mathbf{R} este raza vectoare a unui punct oarecare de pe suprafața sferei. Soluția problemei electrostatice nu s-ar schimba dacă am putea să-i comunicăm cristalului după bunul nostru plac, înainte încă de experiență, o anumită inducție spontană, $\mathbf{D}^{(0)}$, fără a modifica prin aceasta permitivitatea lui dielectrică $\boldsymbol{\kappa}$, și deci și a tensorilor $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$. Prin urmare direcțiile vectorilor \mathbf{R} și $\mathbf{D}^{(0)}$ se pot considera arbitrare și se poate trece deci de la egalitățile (31.5) și (31.6) la ecuațiile tensoriale

$$\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\gamma} = 0, \quad \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{I} = 0.$$

Rezolvându-le, obținem

$$\boldsymbol{\gamma} = -\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1}. \quad (31.7)$$

În concluzie, în jurul unui piroelectric apare un câmp cu intensitatea

$$\mathbf{E}^{(e)} = -\text{grad } \varphi^{(e)} = (R^3/r^5)(3\mathbf{r}\mathbf{r} - r^2\mathbf{I})(\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{D}^{(0)}, \quad (31.8)$$

care descrește cu distanța de la cristal, ca $1/r^3$, pe când, în interiorul cristalului apare un câmp omogen cu intensitatea

$$\mathbf{E}^{(i)} = -(\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{D}^{(0)} \quad (31.9)$$

și cu inducția

$$\mathbf{D}^{(i)} = \mathbf{D}^{(0)} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}^{(i)} = -(\boldsymbol{\kappa} + 2\mathbf{I}) \cdot \mathbf{E}^{(i)} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}^{(i)} = -2\mathbf{E}^{(i)}, \quad (31.10)$$

care, după cum se vede, nu mai este egală cu inducția spontană. Câmpul vectorului inducție și câmpul vectorului intensitate sînt reprezentate în figura 31.1.

Cristalele piroelectrice de altă formă, în absența câmpului electric exterior, se vor comporta analog. Câmpul din interiorul lor nu va mai fi desigur omogen, însă ceea ce este important, de regulă, el este diferit de zero. Ele dau naștere, de asemenea, în jurul lor unui câmp, care coincide ce-i drept, cu câmpul dipolu-

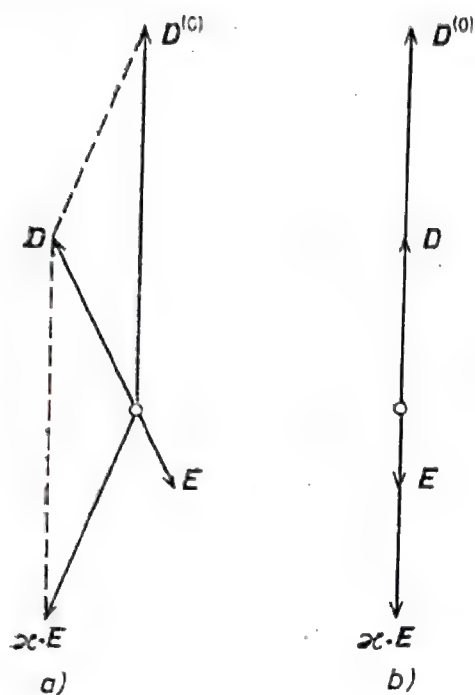


Fig 31.1. Aranjarea reciprocă a vectorilor inducție spontană și cîmp electric într-o sferă dintr-un cristal piroelectric: a) clasa 1 sau m ; b) oricare dintre celelalte clase de piroelectrice.

lui numai la distanțe cu mult mai mari decît dimensiunile liniare ale cristalului, în apropiere fiind însă deformat într-un grad mai mare sau mai mic, în funcție de forma cristalului. Existența însă a unor cîmpuri, atît în exteriorul cît și în interiorul cristalului, este o trăsătură comună tuturor cristalelor piroelectrice, independent de forma lor.

Este evident că în condițiile reale de existență a cristalelor este exclusă posibilitatea unei existențe nelimitate, a acestor cîmpuri. Toți dielectricii prezintă totdeauna o anumită conducibilitate, chiar dacă este foarte mică, totdeauna însă diferită de zero, ceea ce face ca în consecință, în cristal să apară un transport lent de sarcină; cîmpul creat de sarcinile transportate spre suprafață va acționa atît împotriva cîmpului din exteriorul cristalului, cît și a cîmpului din interiorul lui. În afară de aceasta, în atmosferă se află totdeauna o anumită cantitate de ioni care, sub acțiunea cîmpului existent în exteriorul cristalului, vor fi atrași în funcție de semnul sarcinii lor, de o anumită porțiune a suprafeței cristalului, cîmpurile ionilor vor fi, de asemenea de semn contrar cîmpului cristalului și, în cele din urmă, îl vor compensa.

Din această cauză, proprietățile piroelectrice ale unui cristal se observă și se măsoară, variind temperatura suficient de rapid deoarece polarizarea spontană depinde de temperatură. De aici și denumirea fenomenului însuși — piroelectricitate („piros” — în limba greacă înseamnă foc). Așadar, se măsoară nu polarizarea

spontană însăși, ci numai variația ei cu temperatura. În prima aproximație, ea este liniară

$$P^{(0)}(T) - P^{(0)}(T_0) = p(T - T_0). \quad (31.11)$$

Vectorul p se numește *vectorul coeficienților piroelectrici*. Caracteristica fundamentală însă a unui piroelectric, care determină posibilitatea utilizării lui practice, este *factorul de calitate piroelectric*, p/κ , adică raportul dintre mărimea absolută a coeficientului piroelectric, p , și componenta normală a tensorului permittivității dielectrice în direcția axei piroelectrice, $\kappa = p \cdot \epsilon \cdot p / p^2$.

Utilizarea practică a efectului piroelectric a devenit posibilă numai de câțiva ani (față de 1975 — anul apariției lucrării în limba rusă — n.red.), când a fost asimilată producția industrială de cristale cu valori mari ale coeficientului piroelectric (mai ales a seignetoelectricilor — grupă importantă și specifică de piroelectrici; vezi, despre ele § 65) (tabelul 31.1). În primul rând,

Tabelul 31.1

Valorile coeficientului piroelectric, în unități CGSes, pentru unele cristale

Substanța	p	Clasa de simetrie
Turmalină	1—1,3	3m
Acid tartric	7,8	2
Etilendiamintartrat	2,3—2,6	2
Sulfat de litiu, monohidrat	23—30	2
Selenat de litiu, monohidrat	17,1	2
Boracit	1—3	2
Niobat de litiu	60—200	3m
Titanat de bariu, monocristal	50—100	4mm
Ceramica PZT (zirconat-titanat de plumb)	3,5—5,0	∞m
KDP (dihidrofosfat de kaliu)	1600	mm2
($\sim T_{Curie}$, într-un câmp de 8,5 kV/cm)		

trebuie să menționăm aici sulfatul de litiu și selenatul de litiu, la care valoarea coeficientului piroelectric este cu un ordin de mărime mai mare decât la toate cristalele piroelectrice cunoscute pînă acum. Deficiența noilor piroelectrici constă însă în dependența puternică a coeficientului piroelectric de temperatură și instabilitatea, astfel determinată, a efectului piroelectric. Un efect piroelectric considerabil îl au și unele texturi, în special ceramica și titanatul de bariu.

Cristalele piroelectrice se utilizează la termometrele electrice, care permit măsurarea temperaturii cu o exactitate de pînă la 10^{-6} grade, precum și la construirea unor receptori sensibili de

fluxuri termice cu variație rapidă, în particular, a radiației infra-roșii. Din acest punct de vedere, utilizarea cristalelor piroelectrice are o perspectivă extraordinară.

§ 32. CURENTUL ELECTRIC CONTINUU ÎN CRISTALE

În cristalele conductoare ia naștere, în cazul în care există câmpul electric E , un curent electric, avînd densitatea j . Ecuațiile de bază ale curentului continuu în mediul anizotrop sînt aceleași ca și într-un mediu izotrop

$$\operatorname{rot} E = 0, \quad (32.1)$$

de unde rezultă existența potențialului φ :

$$E = -\operatorname{grad} \varphi, \quad (32.2)$$

și ecuația de continuitate a curentului

$$\operatorname{div} j = 0. \quad (32.3)$$

La trecerea curentului electric, pe unitatea de volum a materia lului conductor și în unitatea de timp se disipă cantitatea de căldură

$$Q = E \cdot j. \quad (32.4)$$

În cristale legea lui Ohm se înlocuiește prin funcția liniară generală

$$j = \sigma \cdot E, \quad (32.5)$$

sau

$$E = \rho \cdot j, \quad (32.6)$$

în care tensorul de rangul doi, σ , se numește *tensorul conductivității electrice*, iar $\rho = \sigma^{-1}$, *tensorul rezistivității*. Cu ajutorul acestor tensori, căldura Joule, Q , poate fi exprimată în două forme echivalente

$$Q = E \cdot \sigma \cdot E = \sigma_{ik} E_i E_k, \quad (32.7)$$

$$Q = j \cdot \rho \cdot j = \rho_{ik} j_i j_k. \quad (32.8)$$

Termodinamica proceselor ireversibile permite o precizare esențială a formulelor (32.5) și (32.6). În primul rând, cu toate că simetria cristalelor claselor piroelectrice nu exclude apariția în expresiile (32.5) și (32.6) a unor termeni constanți $j^{(0)}$ și, respectiv, $E^{(0)}$, termodinamica proceselor ireversibile conchide că acești termeni trebuie să lipsească. În al doilea rând, tensorii σ și ρ trebuie să fie simetrici. În al treilea rând, toate valorile lor proprii trebuie să fie pozitive (vezi § 76).

Influența simetriei cristalelor asupra conductivității lor electrice se studiază exact la fel ca și influența simetriei asupra proprietăților dielectrice. Remarcăm că vectorii proprii ai tensorilor proprietăților dielectrice și ai tensorilor care caracterizează conductivitatea electrică coincid numai în cazurile în care direcțiile lor sînt definite prin elementele de simetrie ale cristalelor. Vectorii proprii ai tensorilor σ și ρ coincid însă totdeauna, dat fiind că acești tensori sînt reciproc inverși.

Să calculăm conductivitatea electrică a unei lamele cristaline de arie S și grosimea d ($d \ll \sqrt{S}$); vectorul unitar al normalei la lamelă este n . Pentru că fețele lamelei trebuie să fie metalizate cîmpul din ea coincide cu cîmpul condensatorului plan

$$E = (U/d)n, \quad (32.9)$$

unde U este diferența de potențial dintre fețele lamelei. Prin urmare, densitatea de curent este

$$j = (U/d)\sigma \cdot n, \quad (32.10)$$

iar curentul total prin lamelă va fi

$$I = Sn \cdot j = (SU/d)n \cdot \sigma \cdot n. \quad (32.11)$$

Astfel, componenta normală a tensorului conductivității joacă în acest caz rolul conductivității electrice după direcția dată. Rezistența lamelei cristaline fiind egală însă cu

$$\frac{U}{I} = \frac{d}{S} \frac{1}{n \cdot \sigma \cdot n}, \quad (32.12)$$

rezultă că drept rezistivitate a lamelei în direcția n trebuie considerată mărimea $1/(n \cdot \sigma \cdot n)$; în general, ea nu este egală cu componenta normală $n \cdot \rho \cdot n$ a tensorului rezistivității.

Să examinăm problema contrară, într-un anumit sens, celei de pînă acum, adică să calculăm rezistența unei bare cristaline de lungime d și suprafață a secțiunii transversale S ($d \gg \sqrt{S}$); vectorul unitar \mathbf{n} definește direcția axei barei. Evident, în acest caz

$$\mathbf{j} = (I/S) \mathbf{n}, \quad (32.13)$$

de unde

$$\mathbf{E} = (I/S) \rho \cdot \mathbf{n}, \quad (32.14)$$

iar diferența de potențial de la capetele barei este

$$U = d \mathbf{n} \cdot \mathbf{E} = (Id/S) \mathbf{n} \cdot \rho \cdot \mathbf{n}. \quad (32.15)$$

În această situație rolul de rezistivitate în direcția \mathbf{n} este jucat de componenta normală a tensorului rezistivității, $\mathbf{n} \cdot \rho \cdot \mathbf{n}$, iar rolul de conductivitate electrică, de inversa mărimii ei, $1/(\mathbf{n} \cdot \rho \cdot \mathbf{n})$.

Din aceste două probleme se poate trage concluzia că expresii ca „mărimia rezistivității după o anumită direcție”, „mărimia conductivității electrice după o anumită direcție” și, în general, „mărimia care caracterizează o proprietate într-o anumită direcție” capătă un sens bine definit numai după ce este desemnată situația în care este măsurată acea proprietate (vezi formulele (30.8) și (30.12)).

§ 33. CONDUCTIBILITATEA TERMICĂ A CRISTALELOR

Conductibilitatea termică a corpurilor solide izotrope se definește plecîndu-se de la proporționalitatea dintre fluxul termic, \mathbf{q} , și gradientul de temperatură, grad T ,

$$\mathbf{q} = - \lambda \text{ grad } T \quad (33.1)$$

(se ia semnul minus pentru ca coeficientul de conductibilitate termică, λ , să poată fi considerat totdeauna pozitiv : fluxul termic este orientat în sensul scăderii temperaturii). Generalizarea imediată a acestei legi, pentru corpurile anizotrope, este

$$\mathbf{q} = - \lambda \text{ grad } T. \quad (33.2)$$

Această formulă este complet analoagă formulei din teoria conductibilității electrice a cristalelor, (32.4), care poate fi scrisă sub

forma

$$\mathbf{j} = -\sigma \cdot \text{grad } \varphi. \quad (33.3)$$

Tensorul conductibilității termice, λ , ca și tensorul conductivității electrice, σ , este simetric și toate valorile lui proprii sînt pozitive.

Evident, $\text{div } \mathbf{q}$ este egală cu cantitatea de căldură care iese din unitatea de volum a corpului, în unitatea de timp. Variația temperaturii în acest volum, în unitatea de timp, este egală cu $-\text{div } \mathbf{q}$, împărțită la căldura specifică a unității de volum, adică la $c\rho$, unde c este căldura specifică (căldura specifică a unității de masă), iar ρ densitatea. De aici rezultă ecuația conductibilității termice a cristalelor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c\rho} \text{div } \mathbf{q} = \frac{1}{c\rho} \text{div } (\lambda \cdot \text{grad } T). \quad (33.4)$$

Deoarece tensorul conductibilității, λ , ca și ρ și c , nu depinde de coordonate, se poate introduce *tensorul de difuzibilitate termică*,

$$k = (1/\rho c)\lambda$$

și se scrie ecuația conductibilității termice sub forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k_{ij} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} \quad (33.5)$$

Dacă în fiecare punct al corpului $\partial T/\partial t = 0$, atunci avem de-a face cu un flux staționar, invariabil în timp. În acest caz renunțînd la factorul $1/c\rho$, care acum nu are valoare, obținem din (33.5) ecuația

$$\lambda_{ij} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} = 0, \quad (33.6)$$

complet analoagă cu ecuația potențialului din teoria curenților continuu. În aceste condiții, conductibilitatea termică a barelor și a lamelor cristaline se va calcula, evident, cu ajutorul unor formule complet analoage celor care au fost deduse în paragraful precedent. Diferența de potențial corespunde acum diferenței de temperatură, intensității curenților — cantitatea de căldură care trece într-o secundă prin bară sau lamă, intensității cîmpului electric — gradientul de temperatură luat cu semnul schimbat, vectorului densitate de curent — vectorul flux termic.

Să examinăm câmpurile termice care apar în cristale în cazul unei încălziri uniforme, adică în cazul creșterii temperaturii mediului înconjurător cu viteza constantă, h grad/s. Evident, o răcire uniformă se tratează exact la fel, numai că h se consideră negativ. După o anumită perioadă de stabilizare (această durată este proporțională cu pătratul dimensiunilor liniare ale corpului, invers proporțională cu difuzibilitatea termică și depinde de condițiile schimbului de la suprafața corpului, mărindu-se substanțial odată cu înrăutățirea condițiilor schimbului de căldură), se poate considera, cu suficientă exactitate, că în fiecare punct al cristalului temperatura crește cu viteza h . Atunci soluția ecuației conductibilității termice, (33.5), se poate căuta de forma

$$T(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) + ht; \quad (33.7)$$

Funcția Φ satisface ecuația

$$k_{ij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j} = h. \quad (33.8)$$

Fie ca o lamelă cristalină de grosime $2a$ să se încălzească uniform de pe suprafața $\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} = \pm a$. Aici \mathbf{n} este vectorul unitar al normalei la planul lamelei, \mathbf{r} este o rază vectorială, măsurată dintr-un punct oarecare ce se află în planul median al lamelei. Să introducem coordonata $z = \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} = n_i x_i$. Evident, temperatura este funcție de z și de timpul t , iar

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial z}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial z} = n_i \frac{\partial}{\partial z}.$$

Ecuația (33.8) se scrie acum sub forma

$$k_{ij} n_i n_j \frac{d^2 \Phi}{dz^2} = h \quad (33.9)$$

și, deoarece temperatura mediului este aceeași pe ambele fețe ale lamelei, $\Phi(-a) = \Phi(a)$. Deci, soluția ecuației (33.9) are forma

$$\Phi(z) = \frac{h}{2 k_{ij} n_i n_j} z^2 + B, \quad (33.10)$$

unde B este o constantă deocamdată necunoscută, care se determină din condițiile la limită. În particular, dacă se consideră

că temperatura $T(\pm a, t)$ de la suprafața cristalului este egală cu temperatura $T_0(t)$ a mediului înconjurător, atunci

$$B = T_0(0) - \frac{ha^2}{2k_{ij} n_i n_j}.$$

De obicei cristalele se încălzesc în aer, sau într-un alt gaz. În acest caz temperatura straturilor superficiale ale cristalului este decalată într-o măsură mai mare, sau mai mică, față de temperatura mediului înconjurător. Condiția la limită corespunzătoare acestei situații, dacă nu se ține cont de schimbul de căldură pe seama radiației, este de forma

$$\frac{\partial T(\pm a, t)}{\partial z} = \pm H[T_0(t) - T(\pm a, t)], \quad (33.11)$$

unde coeficientul H caracterizează condițiile schimbului de căldură la limita dintre cristal și mediul înconjurător: $H = 0$ corespunde absenței totale a unui flux termic prin suprafața cristalului, iar pentru $H \rightarrow \infty$ temperatura straturilor superficiale ale cristalului $T(\pm a, t)$ tinde la temperatura mediului înconjurător, $T_0(t)$. Cu condițiile la limită (33.11)

$$B = T_0(0) - \frac{ha^2}{2k_{ij} n_i n_j} - \frac{ha}{Hk_{ij} n_i n_j};$$

evident că ultimul termen caracterizează tocmai decalarea temperaturii straturilor de la suprafața cristalului față de temperatura mediului înconjurător.

Determinarea coeficientului H este dificilă; în particular, pînă în prezent nu s-a studiat experimental dependența lui de direcția normalei la fața cristalului adiacentă mediului. Totuși unele informații importante asupra distribuției temperaturii în cristal se pot obține și fără a cunoaște acest coeficient. Așa cum se va arăta în § 55, pentru calculul tensiunilor care apar într-un cristal la încălzirea (sau răcirea) lui, este suficient să se cunoască diferența dintre temperatura cristalului într-un anumit punct, $T(z, t)$ și temperatura lui medie, $\langle T(t) \rangle$. În acest caz,

$$\langle T(t) \rangle = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a T(z, t) dz.$$

Cînd se calculează diferența $T - \langle T \rangle$, termenul B , ca și termenul hlt , dispăre, astfel încît pentru cazul unei încălziri uniforme a cristalului cu viteza h , obținem

$$T - \langle T \rangle = \frac{ha^2}{2k_{ij}n_i n_j} \left[\left(\frac{z}{a} \right)^2 - \frac{1}{3} \right]. \quad (33.12)$$

Asupra simetriei proprietăților fizice ale cristalelor vezi: P. Curie (1966); Wigner (1971) precum și manualele de fizică a cristalelor: Voigt (1928); Wooster (1949, 1958); Șubnikov, Flint și Boki (1940); Nye (1967); Koptik (1958); Bhagavantam (1966); Mason (1966); Kleber, Meyer, Schoenborn (1968); Vasilev (1972); Perelomova și Taghieva (1972).

Asupra proprietăților electrice și asupra conductibilității termice a cristalelor vezi cărțile: Ioffe (1932); Born și Huang (1958); Landau și Lifșiț (1957 și 1965); Jdanov (1961); Kittel (1962); Jeludev (1968 și 1969); Karslow și Eger (1964); Varikaș și Haceatrean (1969); Slater (1969).

PROPRIETĂȚILE OPTICE ALE CRISTALELOR

§ 34. UNDELE ELECTROMAGNETICE ÎN CRISTALELE TRANSPARENTE

Propagarea undelor electromagnetice printr-un cristal nemagnetic transparent este dată de ecuațiile lui Maxwell,

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (34.1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0, \quad (34.2)$$

și de ecuația de material,

$$\mathbf{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{D}, \quad E_i = \eta_{ik} D_k. \quad (34.3)$$

În aceste ecuații \mathbf{E} și \mathbf{H} sînt vectorii intensitatea cîmpului electric și, respectiv, al cîmpului magnetic, \mathbf{D} este vectorul inducție electrică, iar c este viteza luminii. Lipsesc termenii care corespund curenților electrici și sarcinilor libere, în virtutea ipotezei că cristalul este transparent, adică este un dielectric ideal. Dacă cristalul nu este un cristal magnetic, vectorii intensitate a cîmpului magnetic, \mathbf{H} , și a inducției magnetice, \mathbf{B} , sînt egali unul cu altul.

Tensorul permitivitate dielectrică, $\boldsymbol{\eta}$, depinde de frecvență; în cazul frecvențelor optice ($\omega \sim (2,5 - 5) \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$), adică în domeniile ultraviolet, vizibil și infraroșu ale spectrului, valorile lui proprii sînt cu mult mai apropiate de 1 decît în cîmpurile statice sau ușor variabile. Pentru majoritatea cristalelor, valorile proprii ale lui $\boldsymbol{\eta}$ (în domeniul vizibil al spectrului) sînt cuprinse în limitele de la 0,17, pentru diamant pînă la 0,62, pentru gheață. Ca și în electrostatică, tensorul $\boldsymbol{\eta}$ este simetric: demonstrarea acestei afirmații este bazată pe termodinamica proceselor ireversibile (vezi Landau și Lifșitș, 1957, §§ 76, 88; acolo este demonstrat că tensorul permitivitate dielectrică este simetric; este clar că și tensorul invers față de permitivitatea dielectrică, adică tensorul impermitivității dielectrice este tot simetric).

Dacă un cîmp electric variabil se propagă în cristal sub formă de unde electromagnetice plane, atunci variația vectorilor

de câmp, \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{H} , în funcție de coordonatele spațiale, \mathbf{r} , și de timpul t este dată de formulele

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0 \exp (i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i \omega t) \\ \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{D}_0 \exp (i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i \omega t) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}_0 \exp (i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i \omega t).\end{aligned}\tag{34.4}$$

Aici ω este pulsația, iar \mathbf{k} este vectorul de undă. El este perpendicular la planul frontului de undă, fiind legat de celelalte caracteristici prin relațiile

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{m} = \frac{\omega}{v} \mathbf{m} = \frac{\omega}{c} n \mathbf{m},\tag{34.5}$$

în care \mathbf{m} este vectorul unitar al normalei undei, λ este lungimea de undă, v este viteza de fază a undei. Raportul dintre viteza undei electromagnetice în vid și viteza de fază a ei într-un anumit mediu,

$$n = c/v\tag{34.6}$$

se numește *indice de refracție* al undei electromagnetice în mediul respectiv. Această definiție a indicelui de refracție este valabilă și pentru o undă în mediul anizotrop.

Așa cum s-a mai remarcat, extinzând asupra mediilor anizotrope acele caracteristici ale substanței, care se folosesc în fizica mediilor izotrope, trebuie să se indice exact procedul de generalizare. În definiția dată, aceasta s-a și făcut: în optica mediilor izotrope indice de refracție, n , al unui mediu dat, pe de o parte este egal cu

$$n = \sin i / \sin r,$$

i fiind unghiul de incidență, iar r , unghiul de refracție, iar pe de altă parte este egal cu raportul dintre viteza de fază în vid și viteza de fază în mediul respectiv, (34.6). Tocmai această a doua proprietate a indicelui de refracție se utilizează pentru generalizarea acestei noțiuni și asupra mediilor anizotrope.

Într-o undă electromagnetică ce se propagă printr-un mediu anizotrop, relațiile spațiale dintre vectorii de câmp, \mathbf{D} , \mathbf{H} și \mathbf{E}

sînt mult mai complicate decît cele referitoare la un mediu izotrop. Ele sînt exprimate prin ecuațiile Maxwell, (34.1) și (34.2); în aceste ecuații trebuie înlocuite expresiile (34.4) pentru vectorii de cîmp ai undei. Acțiunea operațiilor rot, div și d/dt asupra funcțiilor vectoriale exponențiale de forma (34.4) se reduce la înmulțirea vectorială și scalară cu $i\mathbf{k}$ și, respectiv cu $-i\omega$. Din această cauză, pentru undele plane, ecuațiile (34.1) capătă forma

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mathbf{H}, \quad (34.7)$$

iar ecuațiile (34.2), forma

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{D} = 0, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (34.8)$$

Ecuațiile (34.8) exprimă doar perpendicularitatea vectorilor \mathbf{D} și \mathbf{H} pe vectorul de undă \mathbf{k} ; deoarece aceasta rezultă deja din ecuațiile (34.7) se poate pur și simplu face abstracție de ecuațiile (34.8). Vectorii \mathbf{D} și \mathbf{H} se află în planul frontului de undă — la aceasta se reduce afirmația că undele electromagnetice în mediile anizotrope sînt transversale. Pe lângă aceasta, din ecuațiile (34.7) rezultă și perpendicularitatea dintre vectorii \mathbf{H} și \mathbf{D} , precum și dintre vectorii \mathbf{H} și \mathbf{E} (fig. 34.1).

Deci, într-un mediu anizotrop se conservă perpendicularitatea și concordanța de fază a vectorilor \mathbf{E} și \mathbf{H} precum și a vectorilor \mathbf{D} și \mathbf{H} , însă nu se menține coliniaritatea dintre \mathbf{D} și \mathbf{E} .

Împărțind ecuațiile (34.7) la ω/c , vom pune ecuațiile Maxwell pentru undele electromagnetice plane într-un mediu anizotrop, sub forma

$$n\mathbf{m} \times \mathbf{H} = -\mathbf{D}, \quad n\mathbf{m} \times \mathbf{E} = \mathbf{H}. \quad (34.9)$$

Eliminînd din ele intensitatea cîmpului magnetic, \mathbf{H} , obținem relația dintre vectorul intensitate a cîmpului electric și vectorul inducție electrică dintr-o undă electromagnetică plană

$$n^2 \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{E}) = -\mathbf{D},$$

care, după transformări elementare, capătă forma

$$\mathbf{E} - n\mathbf{m} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{n^2} \mathbf{D}. \quad (34.10)$$

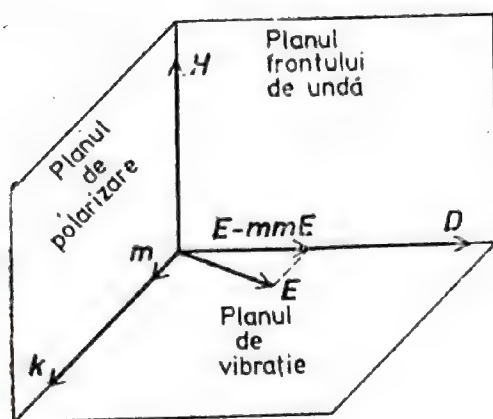


Fig. 34.1. Relațiile spațiale dintre vectorii de câmp ai unei unde electromagnetice într-un mediu anizotrop diamagnetic.

Membrul din stînga al relației (34.10) reprezintă componenta vectorului \mathbf{E} , care se află cuprins în planul frontului de undă (fig. 34.1). Ea este coliniară cu vectorul inducție electrică, raportul dintre modulul ei și modulul vectorului inducție fiind egal cu pătratul raportului dintre viteza undei în mediu și viteza ei în vid. Unda electromagnetică este, ca și pînă acum, transversală, însă în planul frontului de undă, de data aceasta, se află numai vectorii inducție, vectorii intensitate putînd să iasă în afara acestui plan.

Cu ajutorul ecuației de material, (34.3), să eliminăm și intensitatea cîmpului electric din relația (34.10)

$$(\eta - mm \cdot \eta) \cdot \mathbf{D} = \frac{1}{n^2} \mathbf{D}, (\eta_{ik} - m_i m_j \eta_{ik}) D_k = \frac{1}{n^2} D_i. \quad (34.11)$$

Ecuația vectorială obținută definește viteza și polarizarea unei unde electromagnetice care se propagă prin cristal în direcția \mathbf{m} . Pentru studiul ei, să introducem un sistem de coordonate cartezian, special, $X_1 X_2 X_3$: axa X_3 este orientată după normala la undă ($\mathbf{e}_3 = \mathbf{m}$), iar axele reciproc perpendiculare, X_1 și X_2 , se vor afla în planul frontului de undă. Ținînd cont că în sistemul de coordonate special, datorită transversalității vectorului inducției electrice, $D_3 = 0$, vom transcrie ecuația vectorială (34.11), în acest sistem

$$\begin{aligned} \eta_{11} D_1 + \eta_{12} D_2 &= n^{-2} D_1, \\ \eta_{12} D_1 + \eta_{22} D_2 &= n^{-2} D_2; \end{aligned} \quad (34.12)$$

ea s-a redus la numai două ecuații scalare, deoarece a treia reprezintă o identitate banală, $0 = 0$.

Sistemul de ecuații (34.12) arată că n^{-2} este o valoare proprie a unui tensor simetric bidimensional, avînd componentele

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} \end{vmatrix}$$

D fiind vectorul său propriu. Este normal să numim tensorul acesta proiecția tensorului impermitivității dielectrice în planul frontului de undă. Deoarece el este bidimensional, va avea totdeauna două valori proprii; ele sînt rădăcinile ecuației pătratice

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} - n^{-2} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} - n^{-2} \end{vmatrix} = 0; \quad (34.13)$$

fiind egale, evident, cu

$$n_{1,2}^{-2} = \frac{1}{2} [(\eta_{11} + \eta_{22}) \pm \sqrt{(\eta_{11} - \eta_{22})^2 + (2\eta_{12})^2}]. \quad (34.14)$$

Prin urmare, viteza undelor electromagnetice, care se propagă prin cristal într-o direcție m , va fi egală fie cu $v_{(1)} = c/n_{(1)}$, fie cu $v_{(2)} = c/n_{(2)}$.

Fiecărei valori proprii $n_{(q)}^{-2}$ îi corespunde vectorul său propriu $D^{(q)}$. Direcția vectorului inducție electrică, într-o undă care se propagă cu viteza $v_{(1)}$, este dată de oricare dintre următoarele ecuații echivalente

$$(\eta_{11} - n_{(1)}^{-2}) D_1^{(1)} + \eta_{12} D_2^{(1)} = 0, \quad (34.15)$$

$$\eta_{12} D_1^{(1)} + (\eta_{22} - n_{(1)}^{-2}) D_2^{(1)} = 0;$$

direcția vectorului $D^{(2)}$ poate fi găsită analog, însă este mai simplu să folosim faptul că vectorii $D^{(1)}$ și $D^{(2)}$ sînt ortogonali între ei (vectorii proprii, care corespund valorilor proprii care nu coincid, sînt reciproc ortogonali; vezi § 19).

Fie, în particular, ca axele de coordonate X_1 și X_2 în planul frontului de undă să fie alese astfel încît $\eta_{12} = 0$ și $\eta_{11} > \eta_{22}$. Atunci indicii de refracție sînt $n_{(1)} = 1/\sqrt{\eta_{11}}$, $n_{(2)} = 1/\sqrt{\eta_{22}}$, iar vectorii inducției $D^{(1)} \parallel X_1$, $D^{(2)} \parallel X_2$.

În concluzie, în cristale are loc o dublă refracție a luminii: în cazul general, o radiație luminoasă monocromatică ce trece

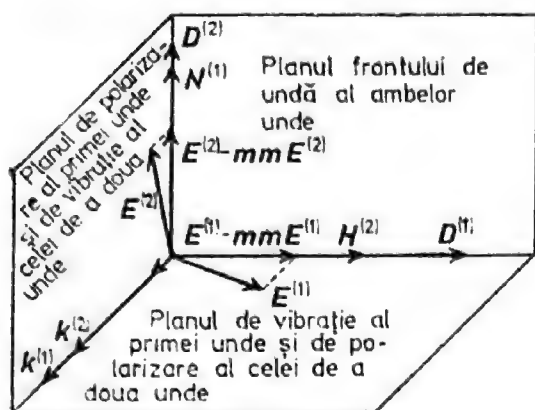


Fig. 34.2. Planurile de polarizare și planurile de vibrație ale celor două unde, din cadrul dublei refracții.

prin cristal într-o anumită direcție se descompune în două unde liniar polarizate, care se propagă cu viteze diferite, $v_{(1)}$ și $v_{(2)}$. Planurile de polarizare ale acestor două unde sînt reciproc perpendiculare (fig. 34.2).

§ 35. INDICATRICEA OPTICĂ

Calculule efectuate în § 34 se pot ilustra printr-o construcție geometrică simplă. Caracteristica tensorului impermitivitate dielectrică, η ,

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} = 1, \quad \eta_{ik} x_i x_k = 1 \quad (35.1)$$

este un elipsoid cu centrul în originea axelor de coordonate, denumit *indicatricea optică* a cristalului (se poate demonstra că toate valorile proprii ale tensorului sînt pozitive).

Să examinăm o secțiune centrală a indicatricei optice cu planul frontului de undă; va fi o elipsă, ale cărei puncte satisfac, toate, simultan atît ecuația indicatricei, (35.1), cît și ecuația planului frontului de undă, care trece prin originea axelor de coordonate, $x_3 = 0$. Ecuația acestei elipse (în același sistem special de coordonate) este

$$\eta_{11}x_1^2 + 2\eta_{12}x_1x_2 + \eta_{22}x_2^2 = 1. \quad (35.2)$$

Dacă orientăm axele X_1 și X_2 ale sistemului special de coordonate după vectorii proprii ai tensorului bidimensional

$$\begin{pmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} \end{pmatrix},$$

atunci, deoarece valorile proprii ale acestui tensor sînt egale cu $n_{(1)}^{-2}$ și $n_{(2)}^{-2}$, ecuația elipsei capătă forma

$$\left(\frac{x_1}{n_{(1)}}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{n_{(2)}}\right)^2 = 1. \quad (35.3)$$

De aici rezultă clar că $n_{(1)}$ și $n_{(2)}$ sînt lungimile semiaxelor principale ale elipsei. După aceleași semiaxe vor fi orientați și vectorii inducție electrică, $D^{(1)}$ și $D^{(2)}$.

Prin urmare, pentru a stabili viteza și polarizarea undelor electromagnetice, care se propagă într-un cristal după orice direcție dată, este suficient să se studieze secțiunea centrală a indicatricii optice cu planul frontului de undă, adică cu planul normal la direcția de propagare a undei. Direcțiile semiaxelor principale ale acestei secțiuni coincid cu direcțiile vectorilor inducție electrică ai undei respective, lungimile acestor semiaxe principale fiind egale cu indicii lor de refracție.

O schemă a unei indicatrici optice este reprezentată în figura 35.1. S este secțiunea centrală, normală la direcția de propagare a undei, iar m , vectorul normalei undei. Semiaxele elipsei sînt egale ca mărime cu $n_{(1)}$ și $n_{(2)}$. Pentru undele cu indicele de refracție $n_{(1)}$ planul de oscilație a vectorului $D^{(1)}$ trece prin $D^{(2)}$ și m , iar pentru unda cu $n_{(2)}$, prin $D^{(2)}$ și m .

Astfel, pentru determinarea vitezei, a indicelui de refracție și a planului de vibrație, pentru undele ce se propagă printr-un cristal după orice direcție, este necesar să se cunoască mărimile semiaxelor indicatricii optice, forma și orientarea ei în cristal.

Mărimile absolute ale semiaxelor indicatricii optice, N_1, N_2, N_3 (cu n notăm indicii de refracție într-o direcție arbitrară, iar cu N , indicii de refracție în direcțiile axelor principale sau indicii de refracție principali) sînt parametri caracteristici ai unei substanțe. Reamintim că ele depind de frecvența de oscilație a cîmpului electromagnetic (cît și de mărimea unor factori exteriori, cum ar fi temperatura, cîmpul electric, tensiunile mecanice etc.; vezi capitolul 9). În ceea ce privește forma și orientarea indicatricii, aceasta este complet determinată de simetria cristalului

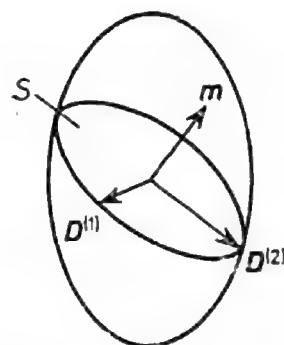


Fig. 35.1. O secțiune centrală a indicatricii optice a unui cristal uniax cu planul frontului de undă.

Categoria cristalului	Valoarea lui N	Forma indicatricii optice	Proprietățile optice ale cristalului
Superioară	$N_{(1)} = N_{(2)} = N_{(3)}$	Sferă	Izotrope
Medie	$N_{(1)} = N_{(2)} \neq N_{(3)}$	Elipsoid de rotație	Uniaxe
Inferioară	$N_{(1)} \neq N_{(2)} \neq N_{(3)}$	Elipsoid cu trei axe	Biaxe

În cristalele din categoria superioară, indicatricea optică este o sferă cu raza $N = 1/\sqrt{\eta}$. Toate secțiunile centrale sînt cercuri, toți indicii de refracție sînt egali între ei, nu există dublă refracție. Relativ la proprietățile optice, cristalele din categoria superioară sînt izotrope.

În cristalele din categoriile medie și inferioară, lumina monocromatică trecînd după orice direcție se descompune, în general, în două unde plan polarizate. În toate aceste cristale există totuși direcții particulare — *axe optice* sau *binormalele* — care sînt, caracterizate prin faptul că secțiunea indicatricei, normală la ele, cu frontul de undă este un cerc. Pentru orice alegere a axelor X_1 și X_2 într-un plan al frontului de undă, perpendicular pe axa optică, proiecția tensorului impermitivității dielectrice, pe acest plan, are componentele,

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} & 0 \\ 0 & \eta_{11} \end{vmatrix}$$

astfel încît ambele rădăcini ale ecuației (34.13) coincid : $n_{(1)}^{-2} = n_{(2)}^{-2} = \eta_{11}$. Orice vector care se află în planul frontului de undă va fi, pentru acest tensor vector propriu al său. Din această cauză de-a lungul axei optice se poate propaga lumină de orice fel de polarizare.

Pentru corpurile izotrope și cristalele sistemului cubic, pentru care indicatricea optică este o sferă și deci toate secțiunile centrale sînt circulare, orice direcție poate fi considerată axă optică.

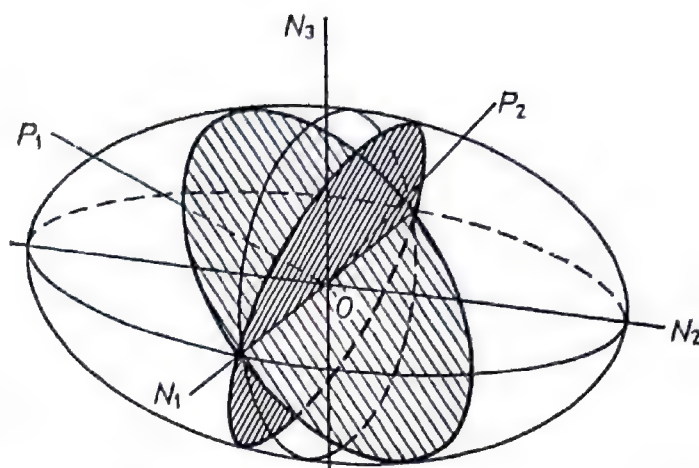
În cazul cristalelor din categoria medie, indicatricea optică este un elipsoid de rotație descris de ecuația (în sistemul de coordonate cristalofizic)

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{N_o^2} + \frac{x_3^2}{N_e^2} = 1. \quad (35.4)$$

Axa de rotație a elipsoidului coincide cu axa principală de simetrie a cristalului, iar singura lui secțiune circulară, care este perpendiculară pe axa principală de simetrie a cristalului, are raza N_o . Axa principală de simetrie este unica axă optică. Cristalele din categoria medie sînt uniaxe din punct de vedere optic. Binormala indicatricei optice coincide cu axa principală de simetrie a cristalului.

În cazul cristalelor din categoria inferioară, indicatricea optică este un elipsoid de formă generală ; într-un sistem de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectricei pentru frecvența dată (acest sistem de coordonate coincide cu sistemul cristalofizic, numai în cazul cristalelor rombice ; în cazul cristalelor monoclinice, sistemul are o singură axă comună cu siste-

Fig. 35.2. O secțiune centrală a indicatricii optice a unui cristal biax.



mul de coordonate cristalofizic), ecuația ei va fi

$$\left(\frac{x_1}{N_1}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{N_2}\right)^2 + \left(\frac{x_3}{N_3}\right)^2 = 1. \quad (35.5)$$

Aici N_1 , N_2 , N_3 sînt indicii principali de refracție: inversele pătratelor lor sînt egale cu valorile proprii ale tensorului impermeabilității dielectrice. Aceste indicatrive au două secțiuni circulare și, corespunzător, două binormale, adică au două axe optice, P_1 și P_2 (fig. 35.2): cristalele din categoria inferioară sînt biaxe din punct de vedere optic. Ecuația (35.1) și interpretarea ei geometrică sub formă de indicatrice optică permit să se caracterizeze intuitiv proprietățile optice ale cristalelor.

În cristalele din categoria medie orientarea axei optice este complet determinată de simetria cristalului: axă optică (binormală) este totdeauna direcția [001] sau [0001], adică axa principală de simetrie a cristalului, planul bazei, (001) sau (0001), fiind o secțiune optic izotropă.

Din (35.4) rezultă că în cristalele optic uniaxe, unul dintre indicii de refracție, $n_{(1)}$, nu depinde de direcție, precum cel de al doilea, $n_{(2)}$, este diferit după direcții diferite. Primul dintre ei se numește de obicei indice de refracție „ordinar” și se notează n_o (sau N_o). Al doilea se numește „extraordinar” și se notează n_e . Valorile lui variază în funcție de direcția de propagare a undei, de la N_o pînă la valoarea extremă, N_e . Prin urmare, $n_o = N_o$ iar n_e variază de la N_o pînă la N_e .

Denumirile de „ordinar” și „extraordinar” își au originea, în faptul că unda cu indicele de refracție n_o coincide cu normala undei ca și în cazul undelor obișnuite în mediile izotrope, pe cînd, în cazul undei cu indicele de refracție n_e unda se abate de la normala undei (vezi § 36).

Diferența $\Delta N = N_e - N_o$ măsoară dubla refracție a unui cristal. Dacă $(N_e - N_o) > 0$, cristalele aniaxe se consideră pozitive; indicatricea optică are forma unui elipsoid de rotație alun-

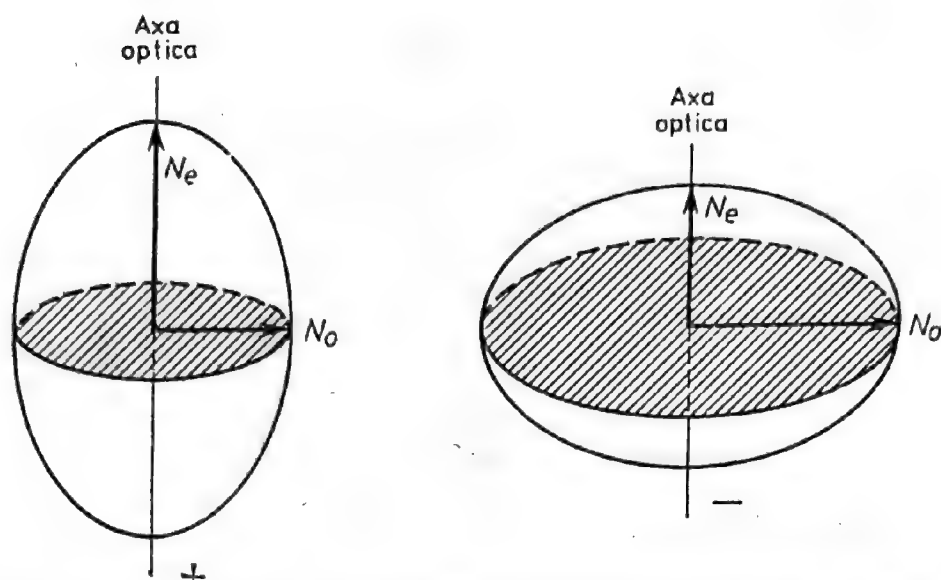


Fig. 35.3. Indicatricile optice ale cristalelor uniaxe pozitive și negative.

git după axa optică. Dacă $(N_e - N_o) < 0$, forma indicatricei optice este un elipsoid de rotație turtit, iar cristalele sînt optic negative (fig. 35.3). Un exemplu de cristale uniaxe pozitive îl constituie cuarțul iar de cristale uniaxe negative calcitul, KDP. O varietate transparentă de calcit — spatul de Islanda — este un exemplu clasic de cristal birefringent; tocmai la acest cristal, în 1669, Erasmus Bartolinus a descris fenomenul de dublă refracție. Turtirea sau alungirea elipsoizilor din figura 35.3 este mult exagerată. Numai pentru cristale cu o dublă refringentă foarte mare, cum ar fi calcitul, silitra, rutilul, diferența dintre N_e și N_o ajunge pînă la aproximativ 10%. O dublă refracție extraordinară o au seleniul și telurul în domeniul infraroșu al spectrului. Pentru majoritatea cristalelor însă diferența dintre N_e și N_o nu depășește fracțiuni de procente (tabelul 35.1).

Tabelul 35.1

Indicii de refracție și birefringența cristalelor

Cristalul	N_o	N_e	ΔN	$\lambda, \mu\text{m}$
Cuarț	1,54424	1,55335	0,009	0,589
Calcit	1,65835	1,48640	0,1719	0,589
Rubin	1,768	1,759	0,008	0,589
Silitră	1,5848	1,3360	0,249	0,589
Rutil	2,62	2,90	0,28	0,589
ADP	1,52478	1,47939	0,045	0,589
KDP	1,50977	1,46856	0,04	0,589
Cristalul	N_1	N_2	N_3	$\lambda_2, \mu\text{m}$
Sulf	1,9576	2,0379	2,2454	0,589
Topaz	1,627	1,620	1,619	0,589
Mică (muscovit)	1,594	1,590	1,561	0,589
Gips	1,530	1,523	1,520	0,589
Sare Selgnette	1,495	1,492	1,490	0,589

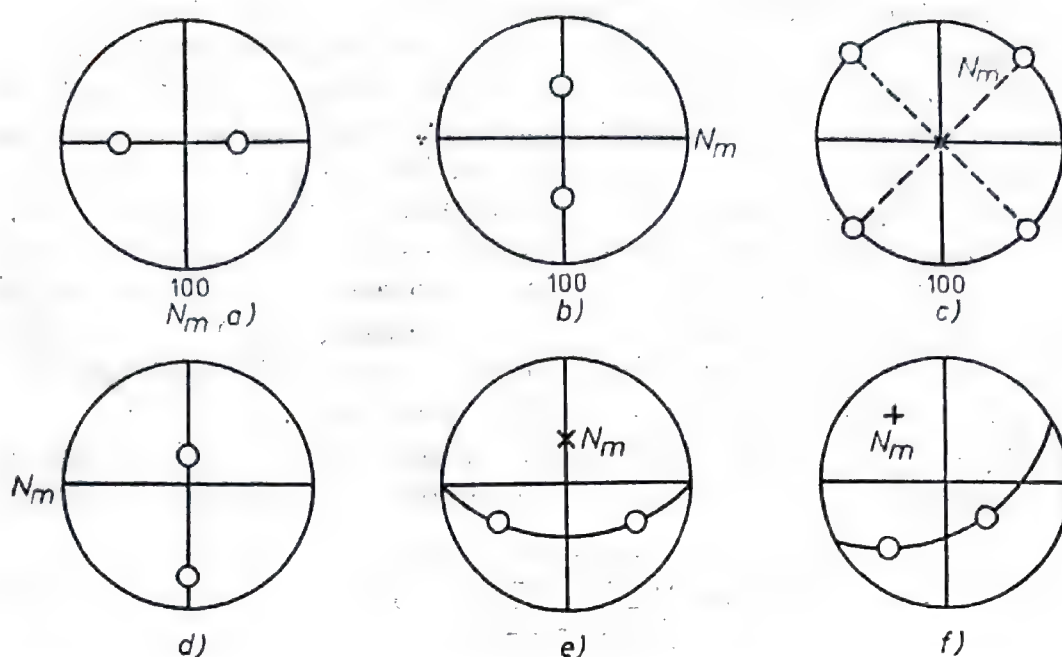


Fig. 35.4. Proiecțiile stereografice ale axelor indicatrice și ale planurilor axelor optice în cristalele biaxe : a), b), c) rombice, d), e) monoclinice, f) triclinice.

În cristalele din categoria inferioară, ambii indici de refracție sînt „extraordinari”, adică mărimea lor depinde de direcție, iar raza incidentă și raza refractată nu se află în același plan. Cristalele sînt optic biaxe. Indicatricea optică are două secțiuni circulare. Linia de intersecție a secțiunilor circulare este axa principală medie a indicatricei optice; ea este perpendiculară pe planul axelor optice. Axa principală mare și cea mică ale indicatricei optice sînt bisectoare ale unghiurilor dintre axele optice. Simetria indicatricei optice este mmm .

În cristalele sistemului rombic, axele principale ale indicatricei optice coincid cu axele cristalografice, adică cu axele 2 sau cu normalele la planul m , iar planul axelor optice cu planurile (100), (001) sau (010).

În cristalele monoclinice una dintre axele indicatricei trece totdeauna de-a lungul axei 2 sau după normala la m , adică coincide cu axa X_2 , iar direcțiile celorlalte două axe, conținute în planul (010), nu depind de simetria cristalului. Planul axelor optice este fie paralel cu unicul plan de simetrie, fie cuprins în planul zonei în care se află axa X_2 .

În sfîrșit, în cristalele triclinice, în general, orientarea indicatricei nu este legată în nici un fel de simetria cristalului, fiind necesar să o determinăm pentru fiecare substanță.

Proiecțiile stereografice ale axelor optice și ale axelor principale ale indicatricei cristalelor din categoria inferioară sînt reprezentate în figura 35.4.

Pentru notarea indicilor de refracție principali, care corespund semiaxelor indicatricei optice a cristalului, se folosesc uneori notațiile convenționale standard (din cuvintele franțuzești: *grande-mare*, *moyen-mieu*, *petit-mic*): N_g — cel mai mare indice de refracție, N_m — indicele de refracție mediu, N_p — cel mai mic indice de refracție. În aceste notații, pentru un cristal uniax, mărimea dublei refracții este $\Delta N = N_g - N_p$, iar pentru unul biax $N_g - N_m$, $N_g - N_p$, $N_m - N_p$; însă, de obicei, cristalele biaxe se caracterizează numai prin diferența maximă, $\Delta N = N_g - N_p$. Menționăm că mărimea dublei refracții și indicii de refracție se măsoară prin metode diferite și cu precizii diferite.

Unghiul V dintre axa principală mare a indicatricei optice a unui cristal biax și axa optică se determină cu ajutorul relației

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{N_p^{-2} - N_m^{-2}}{N_m^{-2} - N_g^{-2}}}, \quad (35.6)$$

unghiul dintre axele optice fiind egal cu $2V$. Cristalul biax se consideră, de obicei, *optic pozitiv*, dacă $2V < 90^\circ$, axa principală mare a indicatricei fiind bisectoare a unui unghi ascuțit, iar cea mică a unui unghi obtuz; un cristal biax se consideră *optic negativ* dacă $2V > 90^\circ$, axa principală mare a indicatricei este bisectoare a unghiului obtuz, iar cea mică a unghiului ascuțit. După cum indicele de refracție mediu, N_m , este apropiat de valoarea cea mai mare, N_g , sau de cea mai mică N_p , unghiul V este aproape de 0 sau de 90° , cristalul apropiindu-se după proprietățile lui optice de cristalele uniaxe pozitive, sau respectiv, de cele negative. Din contra, dacă indicele de refracție mediu, N_m , satisface egalitatea

$$2N_m^{-2} = N_p^{-2} + N_g^{-2},$$

axele optice sînt reciproc perpendiculare ($V = 45^\circ$), cristalul nu este nici pozitiv nici negativ și din punct de vedere al proprietăților lui optice este cel mai îndepărtat de un cristal uniax.

Subliniem că toate aceste definiții au sens numai în cazul unei anumite lungimi de undă a luminii date și pentru o temperatură bine determinată. Datorită dispersiei luminii, sînt posibile cazuri în care o aceeași substanță este optic pozitivă pentru o anumită lungime de undă și optic negativă, pentru altă lungime de undă (vezi mai jos, § 39).

Deci, pentru caracterizarea deplină a proprietăților optice ale cristalelor trebuie măsurate următoarele mărimi:

- pentru cristalele din categoria superioară — N ;
- pentru cristalele din categoria medie — N_g , N_p , semnul optic;
- pentru cristalele din categoria inferioară — N_g , N_m , N_p .

În afară de aceasta, pentru cristalele din categoria inferioară este necesar să se determine orientarea axelor principale ale indicatricei optice și direcțiile binormalelor.

În încheiere, vom sublinia încă o dată profunda deosebire dintre caracterul propagării undelor electromagnetice în mediile izotrope și caracterul propagării undelor electromagnetice în mediile anizotrope. Într-un mediu izotrop transparent în fiecare direcție se pot propaga unde luminoase de orice polarizare, ceea ce înseamnă că se poate propaga și un amestec de unde luminoase cu toate polarizările posibile — lumina naturală. Din contră într-un mediu transparent anizotrop, după o anumită direcție (dacă aceasta nu este axa optică) se pot propaga numai unde luminoase care au numai două polarizări diferite, riguros determinate, avînd totodată vitezele diferite, lumina naturală (adică, în fond, lumină cu orice polarizare) putîndu-se propaga însă numai de-a lungul axelor optice.

Așa cum se va arăta în continuare, diferența în simetrie a cristalelor determină deosebiri în caracterul polarizării luminii care se propagă prin ele: pentru cristalele centrosimetrice este caracteristică polarizarea liniară pe cînd pentru cele necentrosimetrice — polarizarea eliptică și circulară.

Acest mod deosebit de propagare a luminii prin cristale nu este legat nici de proprietățile specifice ale undelor electromagnetice nici de structura internă a cristalelor, ci numai de anizotropia lor. Undele elastice care se propagă într-un mediu anizotrop sînt, de asemenea, polarizate într-un mod strict determinat (vezi § 56).

§ 36. UNDE ȘI RAZE. PRINCIPIUL DUALITĂȚII. ELIPSOIDUL FRESNEL

Vectorul flux de energie (vectorul Poynting), dintr-o undă electromagnetică, este egal, după cum se știe, cu

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{H}; \quad (36.1)$$

vectorul unitar al acestei direcții, \mathbf{s} , se numește *vectorul rază*. Dacă în drumul unei luminoase, într-un cristal transparent, se interpune un ecran opac cu o diafragmă suficient de îngustă (lățimea diafragmei trebuind să fie de cîteva ori mai mare decît lungimea de undă), atunci direcția razei ce trece prin diafragmă se determină tocmai cu ajutorul vectorului \mathbf{s} (fig. 36.1).

Într-un mediu izotrop, pentru o rază ce pleacă de la o sursă punctuală de lumină, suprafața de undă (adică locul geometric al tuturor punctelor pînă la care unda ajunge în aceeași fază după timpul t) are formă sferică; direcția razei va coincide cu normala la frontul de undă, adică la planul tangent la suprafața de undă în momentul t .

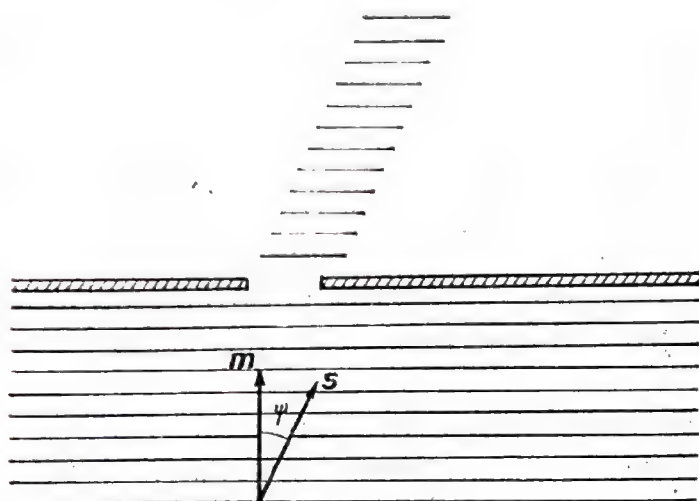


Fig. 36.1. Unda și raza într-un mediu anizotrop.

Viteza de fază și viteza de grup a undei, într-un mediu izotrop, pot fi diferite ca mărime, însă coincid ca direcție. *Viteza de fază* sau *viteza normală* a undei, v , este viteza de deplasare a frontului de undă, orientată după normala la frontul de undă. *Viteza de grup* sau *viteza radială* a undei, u , este viteza radiației, adică viteza de transmitere a energiei, coliniară cu vectorul Poynting, S . Într-un mediu izotrop vectorii v și u sînt coliniari. Într-un mediu anizotrop ei pot fi însă și necoliniari. Anume, dacă direcțiile vectorilor E și D din unda electromagnetică sînt diferite, atunci sînt diferite (făcînd același unghi) și direcțiile vectorilor s și m . Într-adevăr, din definirea vectorului Poynting, (36.1), este clar că vectorii E , H și s ca și D , H și m formează un triplet de vectori, drept; dacă însă E și D nu sînt coliniari, atunci raza s și normala la frontul de undă, m , vor fi tot necoliniare, iar aceasta înseamnă că cele două triplete drepte nu coincid (vezi figura 35.1). În acest caz vitezele — cea de fază, v , și cea de grup, u — au, de asemenea, direcții diferite, formînd între ele un unghi ψ . Viteza de grup a undei luminoase, sau același lucru, viteza razei de lumină este

$$u = v / \cos \psi = v(m \cdot s).$$

Așa că ea, fie coincide cu viteza de fază, și ca mărime, și ca direcție, fie este diferită de viteza de fază ca direcție și o depășește

în mărime. Mărimea inversă față de indicele de refracție al razei

$$q = u/c, \quad (36.2)$$

este legată de indicele de refracție, n , prin relația

$$nq = \frac{1}{m \cdot s} = \frac{1}{\cos \psi}. \quad (36.3)$$

Din formula (36.1) este clar că vectorul rază este perpendicular pe vectorul intensitate a câmpului electric și pe vectorul intensitate a câmpului magnetic

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{s} \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (36.4)$$

Folosind aceasta, vom evalua

$$\mathbf{s} \times \mathbf{D} = -n\mathbf{s} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}) = n(\mathbf{s} \cdot \mathbf{m}\mathbf{H} - \mathbf{s} \cdot \mathbf{H}\mathbf{m}) = (n \cos \psi) \mathbf{H},$$

$$\mathbf{s} \times \mathbf{H} = n\mathbf{s} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{E}) = n(\mathbf{s} \cdot \mathbf{E}\mathbf{m} - \mathbf{s} \cdot \mathbf{m}\mathbf{E}) = -(n \cos \psi)\mathbf{E};$$

aceste relații sînt foarte asemănătoare cu ecuațiile Maxwell pentru unda luminoasă plană, deduse în § 34, în forma (34.9). Pentru a le face mai intuitive, le vom transforma un pic, transcriindu-le împreună cu ecuațiile (34.9) și completîndu-le cu ecuațiile de material corespunzătoare (κ fiind tensorul permitivității dielectrice pentru aceeași frecvență, ω):

Ecuațiile Maxwell

pentru unda luminoasă

pentru raza de lumină

$$nm \times \mathbf{H} = -\mathbf{D}, \quad (34.9) \quad qs \times \mathbf{H} = -\mathbf{E}, \quad (36.5)$$

$$nm \times \mathbf{E} = \mathbf{H}, \quad qs \times \mathbf{D} = \mathbf{H},$$

$$\mathbf{E} = \eta \cdot \mathbf{D}, \quad (34.2) \quad \mathbf{D} = \kappa \cdot \mathbf{E}. \quad (36.6)$$

Prin urmare, sistemul de ecuații pentru undă trece în sistemul de ecuații pentru rază dacă se fac substituțiile

$$\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{D}, \quad \mathbf{D} \rightarrow \mathbf{E}, \quad \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}, \quad \mathbf{m} \rightarrow \mathbf{s}, \quad n \rightarrow q, \quad \eta \rightarrow \kappa. \quad (36.7)$$

Aceasta permite ca din orice relație pentru undă să se obțină, complet formal — prin simpla substituire (36.7) — relațiile corespunzătoare pentru rază (și viceversa).

Principiul dualității afirmă că : orice relație, adevărată pentru mărimile E, D, H, m, n, η sau D, E, H, s, q, κ , rămâne adevărată în cazul înlocuirii mărimilor conform regulii (36.7).

Rolul pe care, pentru undele luminoase, îl are indicatricea optică, revine, pentru razele luminoase *elipsoidului Fresnel*

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} = 1, \quad \kappa_{ik} x_i x_k = 1, \quad (36.8)$$

care nu este altceva decât caracteristica tensorului permitivității dielectrice.

Pentru corpurile izotrope și cristalele sistemului cubic, elipsoidul Fresnel este o sferă cu raza $q = 1/n = 1/\sqrt{\epsilon}$.

În cazul cristalelor uniaxe, elipsoidul Fresnel este un elipsoid de rotație. În sistemul de coordonate cristalofizic ecuația sa va fi

$$N_o^2 (x_1^2 + x_2^2) + N_e^2 x_3^2 = 1 \quad (36.9)$$

(pătratele indicilor de refracție principali fiind inverse față de valorile tensorului η vor fi deci egale cu valorile proprii ale tensorului care este inversul său, κ). Elipsoidul de rotație are o singură secțiune circulară care este perpendiculară pe axa optică principală a cristalului.

Pentru cristalele uniaxe, optic pozitive elipsoidul Fresnel este turtit, iar pentru cele negative este alungit (fig. 36.2).

În cazul cristalelor biaxe, acest elipsoid este un elipsoid de formă generală, avînd două secțiuni circulare (fig. 36.3). În sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor electrici, ecuația sa este

$$N_1 x_1^2 + N_2 x_2^2 + N_3 x_3^2 = 1. \quad (36.10)$$

Axele principale ale indicatricei optice și ale elipsoidului Fresnel pentru o lumină monocromatică, de o aceeași frecvență, coincid totdeauna, dat fiind că tensorii reciproc inversi vor avea aceiași vectori proprii.

Pentru a explica viteza și polarizarea razei care se propagă într-un cristal după direcția \mathbf{s} , trebuie examinată secțiunea centrală a elipsoidului Fresnel, cu un plan perpendicular pe direcția razei. În general, această secțiune este o elipsă. Atunci rezultă că după o anumită direcție se propagă două raze polarizate după direcții reciproc perpendiculare cu viteze diferite, avînd normale de undă diferite. Lungimile semiaxelor principale ale elipsei, $q_{(1)}$ și $q_{(2)}$, sînt proporționale cu vitezele lor,

$$u_{(1)} = q_{(1)} c, \quad u_{(2)} = q_{(2)} c, \quad (36.11)$$

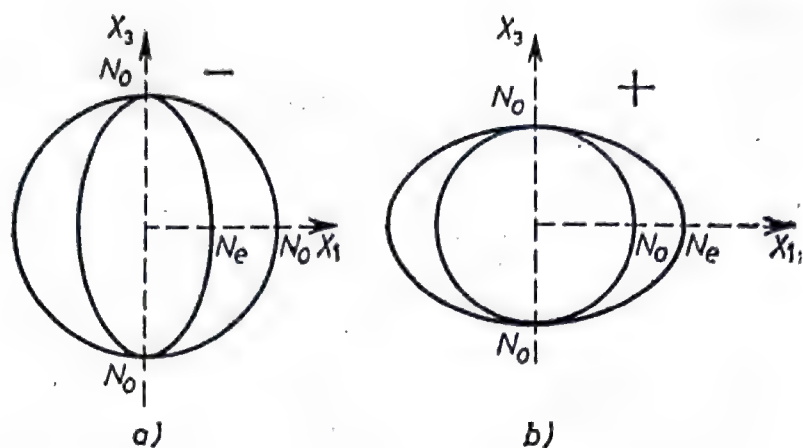


Fig. 36.2. Suprafețele indicilor de refracție ai cristalului uniace: a) optic negative, b) optic pozitive.

iar direcțiile semiaxelor principale coincid cu direcțiile vectorului intensității câmpului electric, $\mathbf{E}^{(1)}$ și $\mathbf{E}^{(2)}$. Dacă însă direcția \mathbf{s} va fi perpendiculară pe una dintre secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel, atunci, în această direcție se poate propaga o rază de

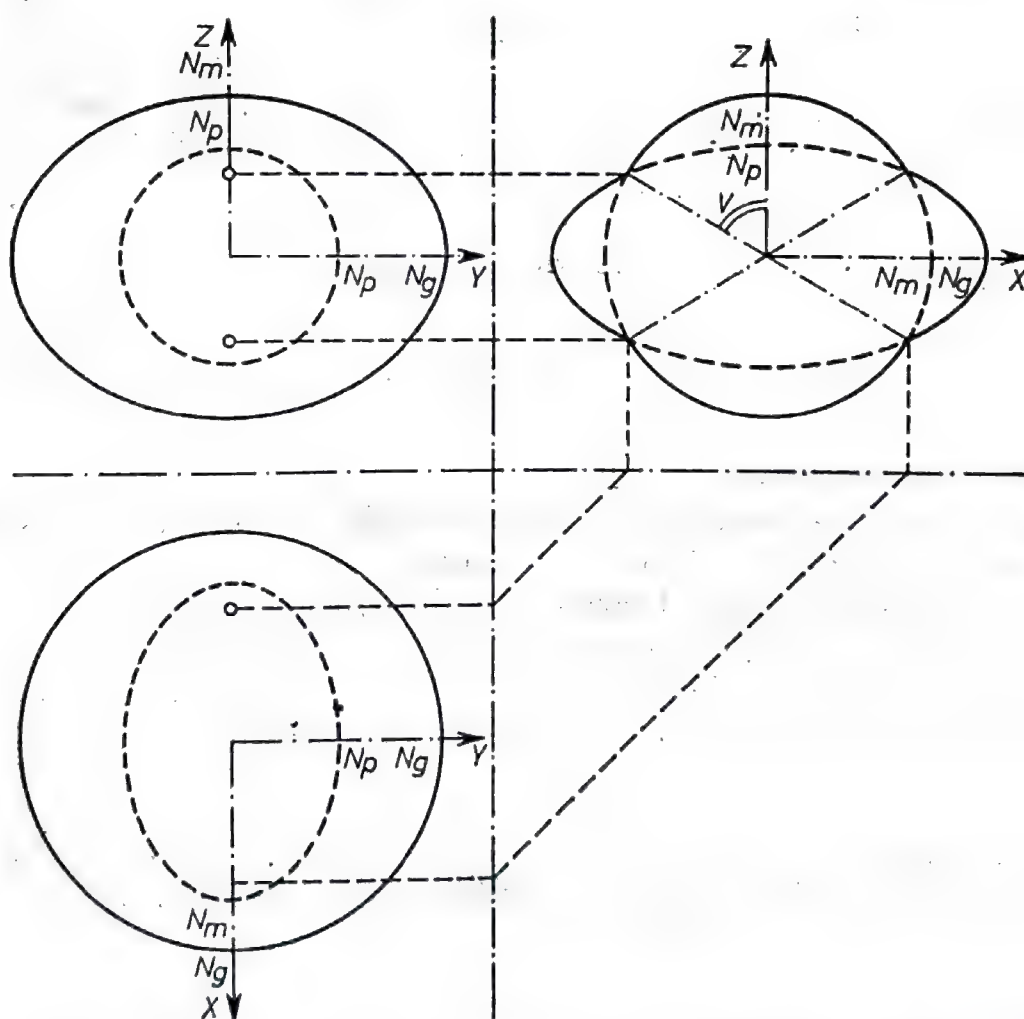


Fig. 36.3. Suprafața indicilor de refracție ai cristalului biace în trei proiecții.

lumină naturală, avind viteza u , determinată de raza q a acestei secțiuni circulare : $u = qv$.

Pentru corpurile izotrope și cristalele cubice, $q = 1/n$, în cazul cristalelor uniaxe, $q = 1/N_0$, iar pentru cele biaxe $q = 1/N_m$. Direcțiile perpendiculare la secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel se numesc *axe optice radiale* sau *biradiale*. În cazul cristalelor uniaxe, biradialele coincid cu binormalele, pe cînd la cele biaxe, nu mai coincid, fiind însă cuprinse împreună cu acestea în planul axelor optice.

Practic, pentru calculul vitezelor și al polarizărilor razelor este convenabil să se utilizeze un sistem special de axe de coordonate care are axa X_3 orientată după rază, iar axele X_1 și X_2 perpendiculare pe rază. Calculînd componentele necesare ale tensorului permitivității dielectrice, κ , în acest sistem de coordonate, se pot ușor determina, din ecuația

$$\begin{vmatrix} \kappa_{11} - q^{-2} & \kappa_{12} \\ \kappa_{12} & \kappa_{22} - q^{-2} \end{vmatrix} = 0, \quad (36.12)$$

mărimile $q_{(1)}$ și $q_{(2)}$, iar după aceasta, aplicînd formula (36.11), și vitezele radiale. Direcția vectorului $E^{(1)}$ se determină folosind oricare dintre ecuațiile

$$\begin{aligned} (\kappa_{11} - q_{(1)}^{-2}) E_1^{(1)} + \kappa_{12} E_2^{(1)} &= 0, \\ \kappa_{12} E_1^{(1)} + (\kappa_{22} - q_{(1)}^{-2}) E_2^{(1)} &= 0, \end{aligned} \quad (36.13)$$

vectorul $E^{(2)}$ fiind perpendicular pe el.

Subliniem că reciprocitatea dintre unde și raze, care se exprimă prin substituțiile (36.7), are loc numai în interiorul cristalului, nu și pe suprafața lui. Deoarece condițiile la limită pentru vectorii D și E sînt complet diferite, reflexia și refracția razelor luminoase pe suprafața cristalului se deosebesc esențial de reflexia și refracția undelor luminoase, în interiorul cristalului.

§ 37. REZOLVAREA PROBLEMEI PROPAGĂRII LUMINII PRINTR-UN CRISTAL, PENTRU UN SISTEM DE COORDONATE ARBITRAR

Problema propagării undelor electromagnetice plane printr-un mediu anizotrop este atît de importantă, încît se impune să exami-

năm rezolvarea ei într-un sistem cartezian de coordonate complet arbitrar, nelegat în nici un fel, nici de direcția de propagare a luminii, nici de axele principale ale indicatricei optice.

Fie \mathbf{m} un vector unitar, normal la frontul undei electromagnetice plane, cu o frecvență ω , dată, iar $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}(\omega)$ tensorul impermi-tivității dielectrice pentru această frecvență. În sistemul cartezian arbitrar de coordonate, ecuația indicatricei optice este de forma

$$\eta_{ik} x_i x_k = 1, \quad \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r} = 1, \quad (37.1)$$

iar ecuația planului ce trece prin centrul indicatricei, paralel cu frontul de undă, va fi

$$m_i x_i = 0, \quad \mathbf{m} \cdot \mathbf{r} = 0. \quad (37.2)$$

Secțiunea indicatricei optice cu acest plan este o elipsă; toate punctele ei satisfac ambele ecuații. Direcțiile și lungimile semiaxe-lor principale ale acestei elipse coincid respectiv cu direcțiile de oscilație și cu indicii de refracție ai undelor electromagnetice avînd normala \mathbf{m} , unde care se propagă în cristalul considerat.

Lungimile semiaxelor principale ale elipsei reprezintă dis-tanțele cele mai mari sau cele mai mici dintre punctele elipsei și centrul ei. Rezultă că indicii de refracție și direcțiile de vibrație se pot găsi rezolvînd problema stabilirii distanțelor față de centrul elipsei a celor mai depărtate sau celor mai apropiate puncte ale ei și a direcției în care se află acestea față de centrul elipsei.

Raza vectoare a unui punct oarecare, $\mathbf{r} = x_i \mathbf{e}_i$, poate fi scrisă sub forma

$$\mathbf{r} = n\mathbf{p}, \quad x_i = n p_i, \quad (37.3)$$

n fiind lungimea acestui vector, iar \mathbf{p} vectorul unitar avînd aceeași direcție

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = 1, \quad p_i p_i = 1. \quad (37.4)$$

Atunci ecuația indicatricei optice, (37.1), capătă forma

$$n^2 \eta_{ik} p_i p_k = 1, \quad n^2 \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p} = 1.$$

Pentru punctele elipsei, vectorul unitar \mathbf{p} satisface ecuația

$$m_i p_i = 0, \quad \mathbf{m} \cdot \mathbf{p} = 0. \quad (37.5)$$

Prin urmare, distanța dintre orice punct al indicatricei optice și centrul ei este egală cu

$$n = \frac{1}{\sqrt{\eta_{ik} p_i p_k}} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}}}, \quad (37.6)$$

unde \mathbf{p} este vectorul unitar, care dă direcția în care se află față de centru acest punct. Dacă însă punctul se află pe elipsă, atunci componentele p_i ale vectorului unitar \mathbf{p} trebuie să mai satisfacă și relația (37.5).

Funcția $n^{-2}(\mathbf{p})$ atinge valorile extreme pentru aceleași valori p_i , ca și funcția $n(\mathbf{p})$, fiind însă mult mai comodă pentru studiu decât aceasta din urmă. Astfel, problema s-a redus la următoarea: pentru ce valori ale lui p_i sînt atinse și cu cît sînt egale valorile extreme ale funcției

$$\frac{1}{n^2(p_1, p_2, p_3)} = \eta_{ik} p_i p_k, \quad (37.7)$$

cu condițiile suplimentare

$$\Phi_1(p_1, p_2, p_3) = p_i p_i - 1 = 0,$$

$$\Phi_2(p_1, p_2, p_3) = m_i p_i = 0.$$

Pentru rezolvarea acestei probleme vom utiliza metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminați. Să formăm funcția

$$\begin{aligned} F(p_1, p_2, p_3) &= \frac{1}{2} \frac{1}{n^2} - \frac{1}{2} \lambda \Phi_1 + \mu \Phi_2 = \\ &= \frac{1}{2} \eta_{ik} p_i p_k - \frac{1}{2} \lambda (p_i p_i - 1) + \mu m_i p_i, \end{aligned} \quad (37.8)$$

în care λ și μ sînt multiplicatorii Lagrange. Vectorii $\mathbf{p}^{(q)}$ „bănuți a avea un extrem” și valorile $\lambda_{(q)}$ și $\mu_{(q)}$, care le corespund, se vor determina din sistemul format de ecuațiile

$$\frac{\partial F}{\partial p_i} = \eta_{ik} p_k - \lambda p_i + \mu m_i = 0, \quad (37.9)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p} - \lambda \mathbf{p} + \mu \mathbf{m} = 0,$$

precum și din ecuațiile (37.4) și (37.5). Ecuațiile (37.9) împreună cu ecuația (37.5) formează un sistem de ecuații liniare omogene în raport cu necunoscutele p_1, p_2, p_3, μ :

$$\left. \begin{aligned} (\eta_{11} - \lambda)p_1 + \eta_{12}p_2 + \eta_{13}p_3 + m_1\mu &= 0, \\ \eta_{21}p_1 + (\eta_{22} - \lambda)p_2 + \eta_{23}p_3 + m_2\mu &= 0, \\ \eta_{31}p_1 + \eta_{32}p_2 + (\eta_{33} - \lambda)p_3 + m_3\mu &= 0, \\ m_1p_1 + m_2p_2 + m_3p_3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (37.10)$$

După cum se știe, un sistem de ecuații liniare omogene are soluții nebanale, adică ce nu sînt identic egale cu zero, în cazul, și numai în cazul, în care determinantul acestui sistem este egal cu zero

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} - \lambda & \eta_{12} & \eta_{13} & m_1 \\ \eta_{21} & \eta_{22} - \lambda & \eta_{23} & m_2 \\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} - \lambda & m_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (37.11)$$

Condiția (37.11) reprezintă o ecuație pătratică în raport cu multiplicatorul Lagrange, λ . Se poate arăta ușor că rădăcinile ei, $\lambda_{(1)}$ și $\lambda_{(2)}$ sînt reale (vezi formula (37.18)). Înlocuind una dintre rădăcini de exemplu, $\lambda_{(1)}$, în sistemul (37.10), găsim valorile componentelor care corespund vectorului $\mathbf{p}^{(1)}$ și multiplicatorului Lagrange $\mu_{(1)}$ cu precizie de pînă la normare, adică valorile $\alpha p_1^{(1)}$, $\alpha p_2^{(1)}$, $\alpha p_3^{(1)}$ și $\alpha \mu$. Coeficientul necunoscut, α , se va determina din condițiile (37.4), iar după aceasta vectorul $\mathbf{p}^{(1)}$ și multiplicatorul Lagrange $\mu_{(1)}$ vor fi determinați cu o precizie de pînă la semn, numai dacă $\lambda_{(1)} \neq \lambda_{(2)}$. Această precizie este complet suficientă deoarece centrul elipsei este pentru ea și centrul de simetrie și deci $n(-\mathbf{p}) = n(\mathbf{p})$.

Să examinăm unele proprietăți generale ale soluțiilor acestei probleme. Înmulțind scalar ambii membri ai ecuației (37.9) cu vectorul $\mathbf{p}^{(q)}$, unde $q = 1, 2$, obținem

$$\lambda_{(q)} = \mathbf{p}^{(q)} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}^{(q)}. \quad (37.12)$$

Prin urmare, multiplicatorul Lagrange $\lambda_{(q)}$ este egal cu componenta normală a tensorului impermitivității dielectrice în direcția de oscilație. Din formula (37.7) rezultă că el este pur și simplu inversul pătratului indicelui de refracție a undei luminoase care

are o anumită direcție de vibrație

$$\lambda_{(q)} = n_{(q)}^{-2}. \quad (37.13)$$

Înmulțind scalar ambele părți ale ecuației (37.9) cu vectorul \mathbf{m} , obținem

$$\mu_{(q)} = -\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}^{(q)}, \quad (37.14)$$

Astfel, multiplicatorul Lagrange $\mu_{(q)}$ este egal cu componenta tangențială luată cu semn schimbat a tensorului impermitivității dielectrice după direcția de vibrație \mathbf{p} și după direcția normalei unde \mathbf{m} . Deoarece componentele tangențiale ale unui tensor izotrop sînt egale cu zero, multiplicatorul Lagrange $\mu_{(q)}$ este diferit de zero numai în cristalele optic anizotrope. Fiindcă vectorul unitar al direcției de oscilație, $\mathbf{p}^{(q)}$, este coliniar cu vectorul inducție, $\mathbf{D}^{(q)}$, al unde electromagnetice, care are normala \mathbf{m} și viteza $c/n_{(q)}$ vectorul $\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}^{(q)}$ va fi coliniar cu vectorul intensitate a cîmpului electric, $\mathbf{E}^{(q)}$, al acestei unde. Factorul $\mu_{(q)}$ (luat cu semn invers) este egal cu proiecția vectorului $\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{p}^{(q)}$ pe direcția normalei unde. Prin urmare, el arată în ce măsură vectorul intensitate a cîmpului electric al unde luminoase date se abate de la planul frontului de undă. Această abatere se poate produce numai în cazul propagării luminii într-un mediu optic anizotrop.

Ecuațiile (37.10) și (37.11) se simplifică întrucîtva în sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorului impermitivității dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$. În acest sistem de coordonate ecuația (37.11) capătă forma

$$\begin{aligned} \lambda^2 - (\eta_{(2)} + \eta_{(3)})m_1^2 + (\eta_{(3)} + \eta_{(1)})m_2^2 + (\eta_{(1)} + \eta_{(2)})m_3^2] \lambda + \\ + [\eta_{(2)} \eta_{(3)} m_1^2 + \eta_{(3)} \eta_{(1)} m_2^2 + \eta_{(1)} \eta_{(2)} m_3^2] = 0. \end{aligned} \quad (37.15)$$

Calculînd rădăcinile acestei ecuații pătratice, $\lambda_{(1)}$ și $\lambda_{(2)}$, găsim vectorii direcțiilor de vibrație, $\mathbf{p}^{(1)}$ și $\mathbf{p}^{(2)}$, iar dacă este necesar, multiplicatorii Lagrange $\mu_{(1)}$ și $\mu_{(2)}$ din ecuațiile (37.10), care, în sistemul propriu tensorului $\boldsymbol{\eta}$, capătă forma

$$\left. \begin{aligned} (\eta_{(1)} - \lambda_{(q)})p_1^{(q)} + m_1\mu_{(q)} &= 0, \\ (\eta_{(2)} - \lambda_{(q)})p_2^{(q)} + m_2\mu_{(q)} &= 0, \\ (\eta_{(3)} - \lambda_{(q)})p_3^{(q)} + m_3\mu_{(q)} &= 0, \\ m_1p_1^{(q)} + m_2p_2^{(q)} + m_3p_3^{(q)} &= 0 \\ (q = 1, 2). \end{aligned} \right\} \quad (37.16)$$

O simplificare mult mai substanțială a ecuațiilor (37.10) și (37.11) se poate realiza însă scriind aceste ecuații într-un sistem de coordonate care are una dintre axe, axa X_3 , orientată după vectorul normalei undei, \mathbf{m} . În acest sistem de coordonate, $m_1 = m_2 = 0$, $m_3 = 1$, fiind diferite de zero numai componentele p_1 și p_2 ale vectorului direcție de oscilație. Din cele patru ecuații (37.10) rămân, de fapt, numai două

$$\begin{aligned}(\eta_{11} - \lambda) p_1 + \eta_{12} p_2 &= 0, \\ \eta_{21} p_1 + (\eta_{22} - \lambda) p_2 &= 0.\end{aligned}\quad (37.17)$$

Determinantul acestui sistem de ecuații liniare omogene este egal cu zero numai în cazul în care

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{1}{2} [(\eta_{11} + \eta_{22}) \pm \sqrt{(\eta_{11} - \eta_{22})^2 + (2\eta_{12})^2}]. \quad (37.18)$$

Substituind în ecuația (37.17) pe $\lambda_{(1)}$, găsim componentele vectorului $\mathbf{p}^{(1)}$. După aceasta, cu ajutorul celei de a treia dintre ecuațiile (37.10) putem găsi,

$$\mu_1 = -\eta_{31} p_1^{(1)} - \eta_{32} p_2^{(1)}. \quad (37.19)$$

Vectorul $\mathbf{p}^{(2)}$ și multiplicatorul Lagrange $\mu_{(2)}$ se determină analog.

§ 38. ECUAȚIA FRESNEL. SUPRAFAȚA DE UNDĂ ȘI SUPRAFAȚA DE RADIAȚIE

În § 37 s-a arătat că într-un sistem de axe de coordonate arbitrar, în particular, într-un sistem cristalofizic, ecuația (37.11), pentru determinarea indicilor de refracție ai undei care se propagă după direcția \mathbf{m} , are forma

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} - n^{-2} & \eta_{12} & \eta_{13} & m_1 \\ \eta_{21} & \eta_{22} - n^{-2} & \eta_{23} & m_2 \\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} - n^{-2} & m_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (38.1)$$

Aici n este indicele de refracție, m_1 , m_2 , m_3 fiind componentele vectorului unitar al normalei undei, \mathbf{m} . În sistemul de coordo-

nate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectrics, această ecuație (după înmulțirea cu $n^4 N_1^2 N_2^2 N_3^2$, a ambelor ei părți) se scrie în forma

$$n^4 (N_1^2 m_1^2 + N_2^2 m_2^2 + N_3^2 m_3^2) - n^2 [N_1^2 (N_2^2 + N_3^2) m_1^2 + N_2^2 (N_3^2 + N_1^2) m_2^2 + N_3^2 (N_1^2 + N_2^2) m_3^2] + N_1^2 N_2^2 N_3^2 = 0 \quad (38.2)$$

și se numește *ecuația Fresnel*. Ea definește indicele de refracție, n , ca funcție de vectorul unitar al normalei undei, \mathbf{m} .

Dacă plasăm din originea axelor de coordonate după toate direcțiile segmente de lungime $n(\mathbf{m})$, se obține o suprafață cu două pînze (deoarece aproape fiecareia dintre vectorii \mathbf{m} îi corespund două valori n) a indicilor de refracție. Ecuația ei în coordonate polare se obține din ecuația Fresnel, (38.2), aplicînd substituțiile

$$m_1 = \cos \varphi \sin \theta, \quad m_2 = \sin \varphi \sin \theta, \quad m_3 = \cos \theta, \quad (38.3)$$

iar într-un sistem cartezian, folosind substituțiile

$$nm_1 = x_1, \quad nm_2 = x_2, \quad nm_3 = x_3, \quad n^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2. \quad (38.4)$$

Această suprafață se mai numește *suprafața vectorilor de undă*: dacă dintr-un punct se duc vectorii de undă ai tuturor undelor luminoase de o anumită frecvență care se propagă din cristal, atunci vîrfurile lor formează o suprafață, care este asemenea cu suprafața indicilor de refracție, deoarece lungimile vectorilor de undă sînt proporționale cu indicii de refracție ai undelor corespunzătoare.

Pentru mediile optic izotrope această suprafață este o sferă.

Pentru cristalele uniace ecuația Fresnel (38.2) se reduce la forma

$$(n^2 - N_o^2) \{n^2 [N_o^2 (m_1^2 + m_2^2) + N_o^2 m_3^2] + N_o^2 N_e^2\} = 0. \quad (38.5)$$

Folosind substituțiile (38.4), deducem din ea ecuația suprafeței indicilor de refracție pentru cristalele uniace

$$(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - N_o^2) [N_o^2 (x_1^2 + x_2^2) + N_e^2 x_3^2 - N_o^2 N_e^2] = 0. \quad (38.6)$$

Aceasta este o suprafață dublă, care se descompune într-o sferă,

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = N_o^2,$$

și un elipsoid de rotație,

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{N_o^2} + \frac{x_3^2}{N_e^2} = 1.$$

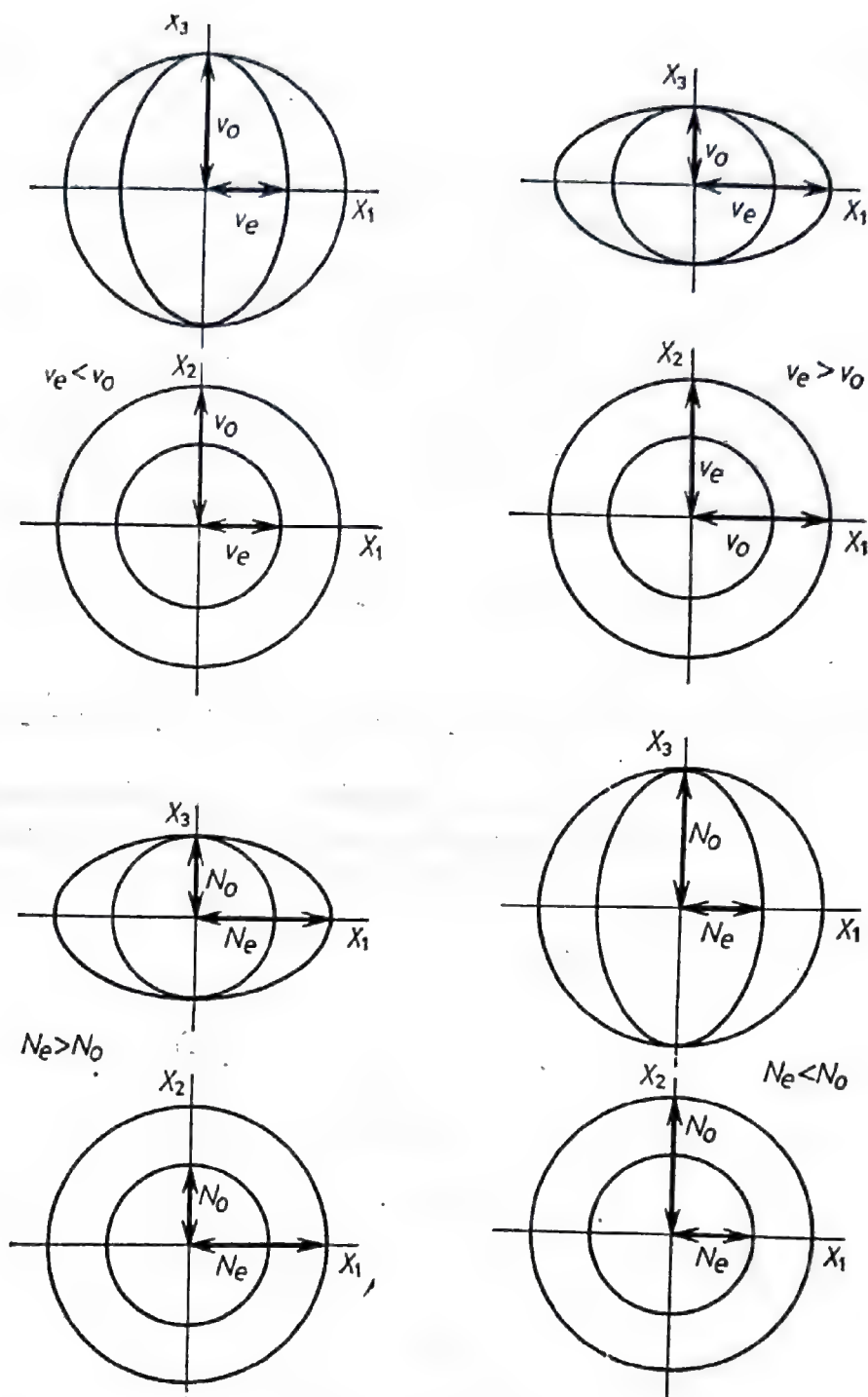


Fig. 38.1. Secțiunile suprafeței indicilor de refracție și ale suprafeței vitezelor de undă pentru cristalele uniaxiale.

Evident, în cristalele categoriei medii unda luminoasă se descompune în două părți: unda ordinară, pentru care viteza și indicele de refracție $n_o = N_o$ nu depind de direcție, și unda extraordinară, pentru care indicii de refracție n_e sînt diferiți după direcții diferite (fig. 38.1).

Sfera și elipsoidul se ating între ele în două puncte care determină direcția axei optice, ce coincide cu axa principală de simetrie.

trie a cristalului. Reamintim că în cristalele optic uniaxe, axa principală de simetrie este axă optică a cristalului și, concomitent, atât binormală (adică normală la secțiunea circulară a indicatricii optice) cât și biradială (adică normală la secțiunea circulară a elipsoidului Fresnel). Unda care se propagă de-a lungul axei optice nu suferă dublă refracție. Cristalele din categoria medie sînt optic uniaxe. Așa cum s-a arătat mai sus, s-a convenit să se considere cristalele uniaxe optic pozitive, dacă $N_e > N_o$, adică sfera este înscrisă în elipsoid, și optic negative, dacă $N_e < N_o$, adică elipsoidul este înscris în sferă.

Studiul ecuației generale Fresnel, (38.2), permite deducerea formei suprafeței indicelui de refracție al cristalelor biaxe. Ecuația acesteia, în coordonate carteziene o vom scrie sub forma

$$(x^2 + y^2 + z^2) (N_p^2 x^2 + N_m^2 y^2 + N_o^2 z^2) - N_p^2 (N_m^2 + N_o^2) x^2 - N_m^2 (N_o^2 + N_p^2) y^2 - N_o^2 (N_p^2 + N_m^2) z^2 + N_p^2 N_m^2 N_o^2 = 0 \quad (38.7)$$

care pune în evidență mărimea relativă a indicilor de refracție principali. Analiza acestei suprafețe de gradul patru este complicată în forma generală, de aceea vom examina mai întâi secțiunile suprafeței cu planurile de coordonate. Secțiunea ei cu planul $z = 0$ este dată de ecuația

$$(x^2 + y^2 - N_o^2) (N_p^2 x^2 + N_m^2 y^2 - N_p^2 N_m^2) = 0, \quad (38.8)$$

care arată că această secțiune constă din cercul

$$x^2 + y^2 = N_o^2$$

și din elipsa

$$\frac{x^2}{N_m^2} + \frac{y^2}{N_p^2} = 1,$$

elipsa găsiindu-se în interiorul cercului.

Secțiunea suprafeței indicilor de refracție cu planul $x = 0$ constă tot dintr-un cerc,

$$y^2 + z^2 = N_p^2$$

și o elipsă

$$\frac{y^2}{N_o^2} + \frac{z^2}{N_m^2} = 1;$$

în acest caz însă cercul se află în interiorul elipsei.

În sfârșit, în secțiunea $y = 0$, cercul

$$x^2 + z^2 = N_m^2$$

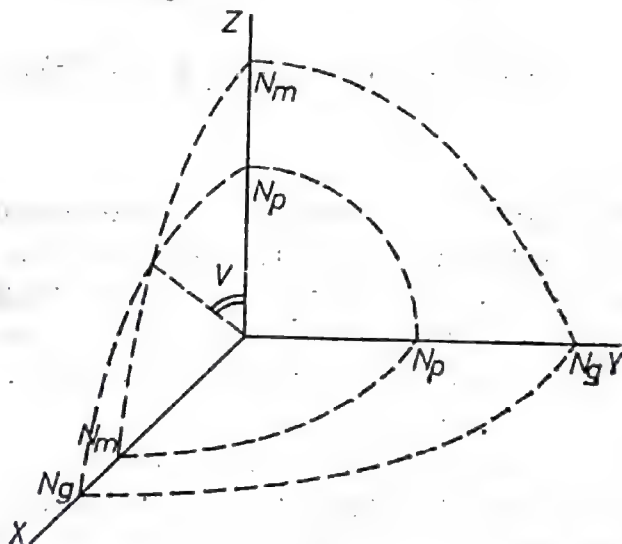
și elipsa

$$\frac{x^2}{N_o^2} + \frac{z^2}{N_p^2} = 1$$

se intersectează.

Punctele lor comune sînt puncte de intersecție ale suprafeței indicilor de refracție cu axele optice, adică cu binormalele indica-

Fig. 38.2. Secțiunile suprafețelor indicilor de refracție ai unui cristal biax cu planurile de coordonate.



trice optice (ne amintim că în cristalele biaxe, binormalele și biradialele nu coincid ca direcție). Forma secțiunilor este dată în figura 38.2.

Reciprocitatea dintre unde și raze, stabilită în §36, ne conduce la rezultate analoge și pentru raze. Utilizînd substituția (36.7), vom transcrie într-un sistem de coordonate arbitrar ecuația pentru determinarea pătratelor indicilor de refracție ale razelor luminoase, care se propagă în direcția vectorului unitar \mathbf{s} de componente s_1, s_2, s_3 :

$$\begin{vmatrix} \kappa_{11} - q^{-2} & \kappa_{12} & \kappa_{13} & s_1 \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} - q^{-2} & \kappa_{23} & s_2 \\ \kappa_{31} & \kappa_{32} & \kappa_{33} - q^{-2} & s_3 \\ s_1 & s_2 & s_3 & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (38.9)$$

În sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectrici, $\eta(\omega)$ și $\kappa(\omega)$, ea capătă forma (după înmulțirea cu q^4)

$$q^4(N_2^2 N_3^2 s_1^2 + N_3^2 N_1^2 s_2^2 + N_1^2 N_2^2 s_3^2) - \\ - q^2[(N_2^2 + N_3^2)s_1^2 + (N_3^2 + N_1^2)s_2^2 + (N_1^2 + N_2^2)s_3^2] + 1 = 0. \quad (38.10)$$

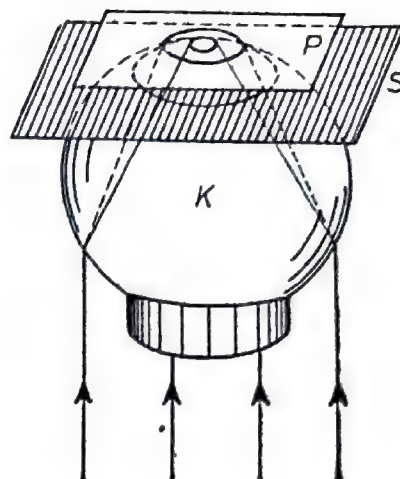
Din această ecuație, prin intermediul substituțiilor (38.3) și (38.4) se obține *ecuația suprafeței de radiație* (uneori ea se mai numește suprafața de undă); în coordonate carteziene ea are următoarea expresie

$$(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)(N_2^2 N_3^2 x_1^2 + N_3^2 N_1^2 x_2^2 + N_1^2 N_2^2 x_3^2) - \\ - (N_2^2 + N_3^2)x_1^2 - (N_3^2 + N_1^2)x_2^2 - (N_1^2 + N_2^2)x_3^2 + 1 = 0. \quad (38.11)$$

Deoarece viteza undei, u , este proporțională cu mărimea q , suprafața de undă poate fi reprezentată intuitiv ca un front de undă, emis de o sursă punctuală de lumină, plasată în centrul acestei suprafețe. Pentru că în fiecare direcție care nu coincide cu biradiala se propagă, cu viteze diferite, două raze polarizate perpendicular între ele, aceasta va fi o suprafață cu două pînze. Ca formă ea amintește de suprafața indicilor de refracție, diferența dintre aceste suprafețe constînd în faptul că suprafața indicilor de refracție taie pe axele de coordonate segmente cu lungimea de N_o , N_e sau N_o , N_m , N_p , pe cînd suprafața de undă taie pe aceleași axe, segmente avînd lungimile $1/N_o$, $1/N_e$ sau $1/N_o$, $1/N_m$, $1/N_p$. De aceea, aceste suprafețe sînt inverse. Astfel, de exemplu, pentru un cristal negativ uniax, suprafața indicilor de refracție va fi elipsoidul de rotație interior sferei, pe cînd suprafața de undă va fi sfera interioară elipsoidului (vezi fig. 38.1). La fel sînt inverse relațiile pentru cristalele pozitive și pentru cele biaxe (vezi tabelul 39.1).

Suprafața de undă a unui cristal uniax se poate vizualiza cu ajutorul unei metode intuitive, propusă de Lemmlein (1934). Conform schemei optice din figura 38.3, fasciculul de lumină converge în interiorul sferei polizate, tăiate dintr-un monocristal de calcit, deci ca și cum ar exista o sursă punctuală, plasată în interiorul cristalului. Frontul de undă emis de această sursă punctuală se înregistrează pe o placă fotografică plană. Rotînd sfera într-o montură semisferică, se poate observa secțiunea suprafețe undei care corespunde diferitelor orientări ale axei optice (fig. 38.4)

Fig. 38.3. Schema optică pentru observarea suprafețelor radiative ale unui cristal după G. G. Lemmlein : K — sferă de calcit (spat de Islanda), S — diafragmă, P — sticlă mată.



§ 39. LEGĂTURA DINTRE SUPRAFEȚELE OPTICE DIN CRISTALE. REFRACTIA CONICĂ

Proprietățile optice ale cristalelor pot fi caracterizate prin diferite mărimi : prin vitezele de undă sau radiative, ori prin indicii de refracție, prin fluxul de energie ori prin deplasarea frontului de undă. Relațiile dintre aceste mărimi se determină cu ajutorul

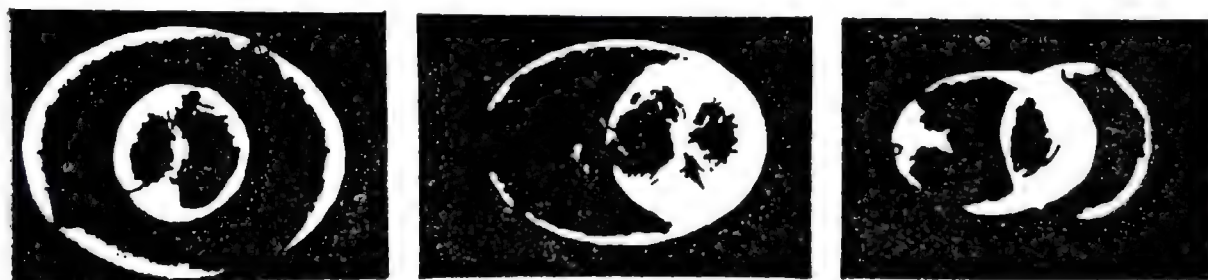


Fig. 38.4. Secțiuni ale suprafeței radiative pentru spatul de Islanda (cristal uniax, optic negativ). Foto G. G. Lemmlein (compară cu figura 38.3).

principiului dualității. Pentru fiecare dintre aceste mărimi se pot construi caracteristici sau suprafețe. Toate aceste suprafețe au fost construite de Fresnel pe baza datelor experimentale, prin observarea fenomenelor optice din cristale, în lumină polarizată și plecând de la considerații referitoare la simetria cristalelor, cu câteva decenii înaintea elaborării teoriei lui Maxwell. Toate aceste suprafețe pot fi deduse din elipsoidul Fresnel.

O listă generală a acestor suprafețe este dată în tabelul 39.1.

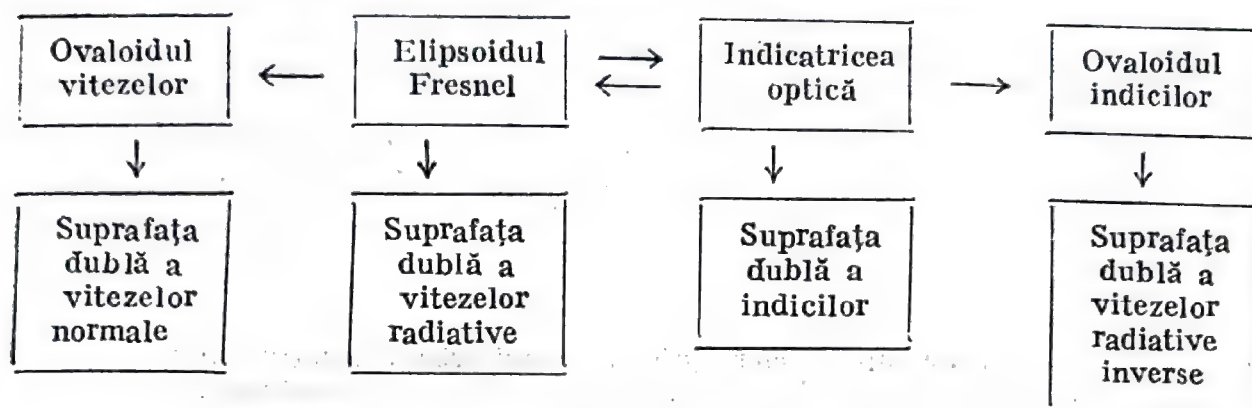
Conform principiului Neumann forma și orientarea tuturor suprafețelor optice, atât de undă cât și normale, sînt legate de simetria cristalului și, în final, depind totdeauna de tensorul permitivității dielectrice sau de tensorul susceptibilității dielectrice.

Suprafețele optice ale cristalelor din categoriile medie și inferioară

Suprafețele						
Caracterul optic al cristalelor	Suprafața de undă (radiativă)	Indicatricea optică	Elipsoidul Fresnel	Suprafața normalelor	Suprafața indicilor de refracție (suprafața vectorilor de undă)	Suprafața inverselor vitezelor (radiative)
Uniaxe pozitive +	Elipsoid de rotație alungit în interiorul sferei	Elipsoid de rotație alungit $N_e > N_o$	Elipsoid de rotație turtit $v_o > v_e$	Ovaloid de rotație alungit, în interiorul unei sfere	Sferă în interiorul unui elipsoid de rotație turtit	Sferă în interiorul unui ovaloid de rotație turtit
Uniaxe negative -	Sferă în interiorul elipsoidului turtit	Elipsoid de rotație turtit $N_o > N_e$	Elipsoid de rotație alungit $v_e > v_o$	Sferă în interiorul unui ovaloid de rotație turtit	Elipsoid de rotație alungit, în interiorul unei sfere	Ovaloid de rotație alungit, în interiorul unei sfere
Biaxe pozitive +	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec biradiialele	$N_g - N_m > N_m - N_p$	$v_1 - v_2 < v_2 - v_3$	Cea mai mare axă, bisectoarea unghiului ascuțit	Cea mai mare axă, bisectoarea unghiului ascuțit	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec biradiialele.
Biaxe negative -		Elipsoid cu trei axe principale neegale	Elipsoid cu trei axe principale neegale	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec axele optice	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec axele optice	
		$N_g - N_m < N_m - N_p$	$v_1 - v_2 > v_2 - v_3$	Cea mai mare axă este bisectoarea unghiului obtuz	Cea mai mare axă este bisectoarea unghiului obtuz	

Pentru interpretarea fenomenelor optice care se observă în cristale, se utilizează, în primul rând, indicatricea optică, suprafața de undă și elipsoidul Fresnel, în unele cazuri fiind însă convenabil să se apeleze și la celelalte suprafețe, care sînt reciproc legate între ele (Șubnikov, 1958).

Schema legăturilor reciproce dintre suprafețele care descriu dubla refracție a cristalelor arată în felul următor :



Relațiile dintre aceste suprafețe corespund relațiilor dintre raza și normala la frontul de undă. Într-un mediu izotrop, în care frontul de undă care vine de la o sursă punctuală are formă

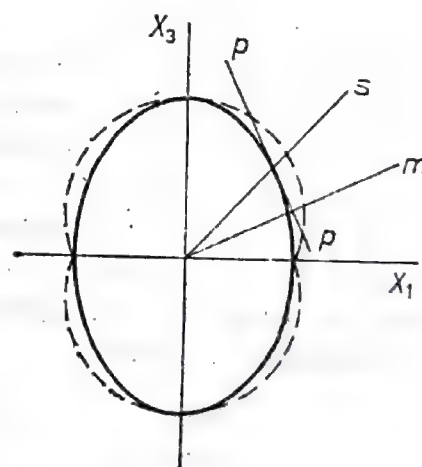


Fig. 39.1. Legătura dintre rază, normală și secțiunile elipsoidului suprafețelor de undă și ovaloidului vitezelor normale.

sferică, raza și normala la front coincid. Într-un mediu anizotrop, direcția razei și direcția normalei coincid numai de-a lungul direcțiilor proprii ale tensorilor dielectrici, ceea ce deosebește tocmai suprafața „undelor” de suprafața „normalelor”. Pentru a construi normala undei, conjugată cu o anumită rază, trebuie dus planul tangent la suprafața de undă în punctul de ieșire a razei, și coborâtă perpendiculara din centrul suprafeței pe acest plan (fig. 39.1). Raportul dintre lungimile acestor segmente este egal cu raportul dintre viteza de radiație și viteza normală (adică de grup și de fază).

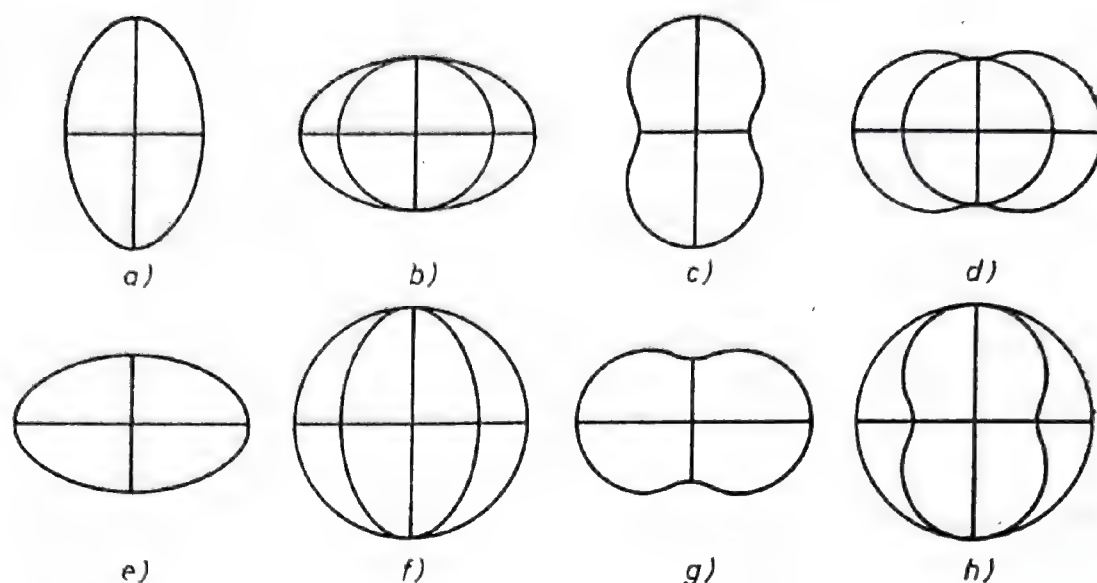


Fig. 39.2. Secțiuni ale suprafețelor optice ale unui cristal negativ uniax cu planul X_3X_1 : a) elipsoidul Fresnel; b) suprafața radiativă; c) ovaloidul vitezelor undelor; d) suprafața normalelor; e) indicatricea optică; f) suprafața indicilor de refracție; g) ovaloidul mărimilor inverse ale vitezelor radiative; h) suprafața mărimilor inverse vitezelor radiative.

Ducînd normalele m , conjugate, ale fiecărei raze s , se poate construi suprafața vitezelor normale. Dacă suprafața vitezelor radiative este un elipsoid, atunci suprafața vitezelor normale, corespunzătoare elipsoidului, va fi un ovaloid. Unei sfere a vitezelor radiale, îi va corespunde tot o sferă, a vitezelor normale.

Toate aceste suprafețe se deduc prin construcții geometrice simple din elipsoidul Fresnel sau din indicatricea optică (vezi Pockels, 1906). În figura 39.2 sînt reprezentate secțiunile a opt suprafețe, construite cu păstrarea scărilor relative pentru un cristal negativ imaginar, pentru care $N_o = 1,86$, $N_e = 1,07$ (Karandeev, 1913).

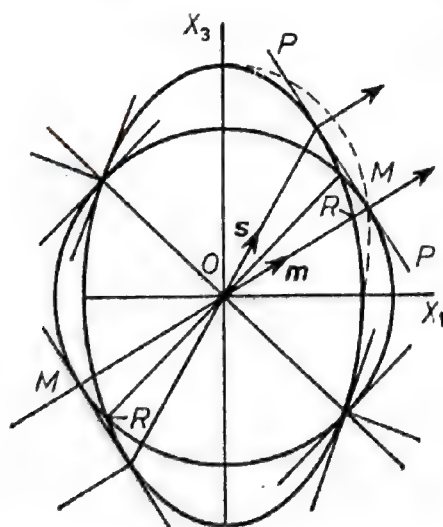


Fig. 39.3. Schemă pentru deducerea fenomenului refracției conice și explicării relației dintre biradiale și binormale.

Analiza acestor suprafețe permite să se pună în evidență și să se interpreteze toate particularitățile refracției și polarizării luminii în cristale. Astfel, comparînd între ele indicatricea optică și suprafața undei, se poate explica intuitiv diferența dintre biradiale și binormale în cazul unui cristal optic biax. Biradialele corespund direcțiilor de-a lungul cărora vitezele de grup sînt aceleași, iar binormalele — direcțiilor în care sînt aceleași vitezele de fază ale undei.

Biradialele sînt perpendiculare pe secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel, pe cînd, binormalele sînt perpendiculare pe secțiunile circulare ale indicatricei optice. Relația dintre ele o explică figura 39.3, în care sînt reprezentate secțiunile cu planul X_3OX_1 ale suprafeței de radiație și ale suprafeței normale în cazul unui cristal biax. Cele patru puncte de intersecție ale elipsei cu cercul determină direcțiile biradialelor RR . Ducînd tangenta comună la cerc și la elipsă și coborînd pe ea normala m , găsim punctele de intersecție ale ovalului cu cercul, adică punctele ce determină direcția binormalelor.

Practic, vitezele radiative și vitezele normale (de fază și de grup) sînt atît de apropiate între ele, încît diferența dintre direcțiile binormalelor și biradialelor nu are nici o importanță nicăieri, în afară de fenomenul cu totul specific al *refracției conice*.

Secțiunii plane a fiecărei binormale îi vor corespunde raze conjugate. Trecînd de la secțiune la volum, putem să ne convingem că planul tangent, PP , este tangenta la suprafața de-a lungul unui cerc, aceasta însemnînd că unei singure direcții a binormalei îi va corespunde o întreagă mulțime de raze conjugate, care formează în interiorul unei lame un con gol, iar în afara lamei un cilindru gol. De aceea, dacă se taie o lamă dintr-un cristal biax, exact perpendicular pe una dintre axele sale optice (una dintre binormale) și se trimite după normala la această lamă un fascicul îngust de lumină naturală, atunci raza nu se va mai descompune numai în două raze, polarizate perpendicular între ele, ci într-o mulțime infinită de raze liniar polarizate în diferite azimuturi (fig. 39.4). O rază de lumină de la o sursă punctuală va da pe un ecran, nu un singur punct, ca în cazul în care s-ar fi propagat de-a lungul axei optice a cristalului uniax, și nici două puncte, cum ar fi fost în cazurile tuturor celorlalte direcții ale unui cristal uniax sau biax, ci un inel luminos, al cărui diametru nu variază cu îndepărtarea ecranului de lamă. Strălucirea cercului nu este aceeași: există o poziție pentru care strălucirea este maximă și o pată întunecată, care corespunde luminozității minime. Dacă se rotește analizorul în jurul direcției razei, atunci pata întunecoasă parcurge o rotație completă pe inel demonstrînd totemai prin aceasta, că razele care construiesc cercul sînt polarizate liniar după



diferite azimuturi. În aceasta tocmai constă fenomenul de *refracție conică internă* (fig. 39.4).

Fenomenul analog — al *refracției conice externe* — constă în aceea că unei singure direcții a biradialei îi corespunde o infinitate de unde, astfel încât normalele la ele formează un con gol (fig. 39.5). Pentru observarea refracției conice externe trebuie ca raza de lumină să fie trimisă prin lama tăiată exact perpendicular pe biradială (fig. 39.5).

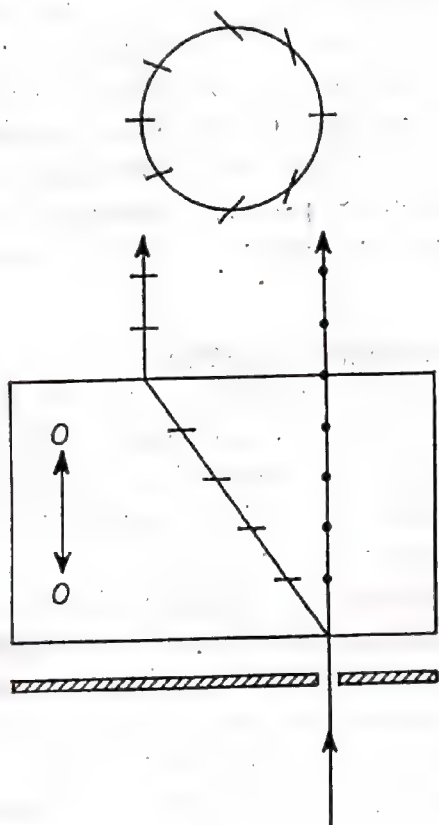


Fig. 39.4. Schema de observare a refracției conice interne: OO — direcția axei optice a cristalului. Prin liniuțe și puncte sînt reprezentate direcțiile de vibrație.

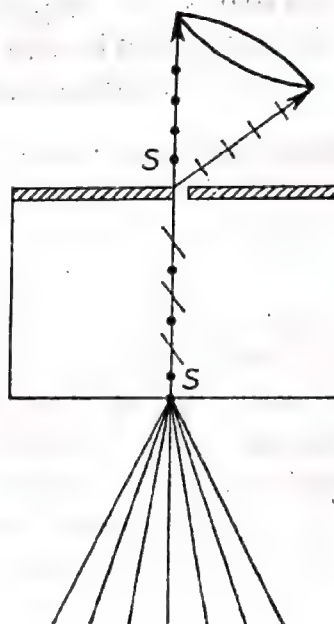


Fig. 39.5. Schema de observare a refracției conice externe: SS — direcția biradialei cristalului. Liniuțele și punctele indică direcțiile de vibrație.

Este interesant de menționat că descoperirea refracției conice reprezintă un exemplu remarcabil de previziune științifică. El a fost prevăzut de William Hamilton în 1832, numai pe baza analizei teoretice a formei suprafeței de undă a cristalelor, construită de către Fresnel. Hamilton a propus lui Lloyd să verifice experimental concluzia sa și, într-adevăr, un an mai târziu (1833), Lloyd a dat descrierea detaliată a observării experimentale a

refracției conice interne și a refracției conice externe, la cristalul de aragonit.

Aragonitul este una dintre puținele substanțe la care se poate vedea fenomenul de refracție conică; pentru majoritatea substanțelor unghiul de refracție conică este atât de mic, încât punerea experimental în evidență a acestui fenomen este practic imposibilă. Așa cum rezultă din (38.7) și (38.11), unghiul conului refracției conice externe, α , este dat de relația

$$\operatorname{tg} \alpha = N_p N_g \sqrt{(N_p^{-2} - N_m^{-2})(N_m^{-2} - N_g^{-2})}. \quad (39.1)$$

Tabelul 39.2

Unghiul conului de refracție conică externă, α , pentru câteva substanțe

Substanța	α	Substanța	α
Aragonit	1°52'	Zahăr	0°52'
Sulf	7°11'	Gips	0°18'
Acid tartric	3°54'	Mică	0°59'
Barită	0°15'	Topaz	0°16'

În tabelul 39.2 sînt date valorile unghiului α pentru unele substanțe.

În încheiere, mai remarcăm că din cauza dispersiei valorilor lui n , forma suprafețelor optice depinde de frecvența undei electromagnetice incidente pe cristal (vezi § 40).

§ 40. OBSERVAREA ANIZOTROPIEI OPTICE A CRISTALELOR ÎN LUMINA POLARIZATĂ

Cunoașterea suprafețelor optice date în tabelul 39.1 este necesară pentru explicarea fenomenelor optice, observate în cristale, în lumina polarizată.

Observarea cristalelor în lumină polarizată se realizează cu ajutorul microscopului de polarizare sau cu instalații de polarizare construite ca în schema din figura 40.1. În calitate de polarizor și analizor se utilizează polaroizi, nicoli sau alte prisme polarizante (prisma Ahrens, prisma Glan, prisma Glau-Thompson, prisma



Rochon etc.). Cînd se folosește metoda luminii convergente (vezi mai jos) în schemă se mai introduc doi condensori.

Fasciculul de lumină naturală trecînd prin polarizor devine plan polarizat, apoi, pătrunzînd în lama cristalină studiată, suferă dubla refracție, astfel încît planurile de polarizare ale celor două raze care iau naștere sînt determinate de planurile de simetrie ale indicatricei optice a cristalului supus observației și de orienta-

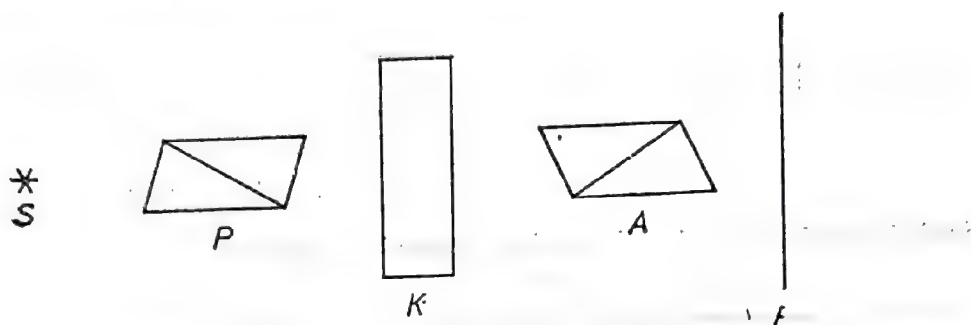


Fig. 40.1. Schema optică de observare a cristalelor în lumină polarizată paralelă : S — sursa de lumină, P — polarizorul, A — analizorul, K — lama cristalografică, E — ecranul.

rea acestora față de raza incidentă. Rolul polarizorului nu constă atît în polarizarea luminii, cît mai ales în a realiza coerența oscilațiilor incidente pe lama cristalină. Cele două raze care iau naștere prin dedublarea razei plan-polarizare sînt coerente, ceea ce înseamnă că ele pot deci interfera. Trecînd prin lama cristalină, aceste două raze capătă o diferență de drum

$$\Delta = d(n_1 - n_2), \quad (40.1)$$

unde d este grosimea lamei, n_1 , n_2 , indicii de refracție ai celor două raze, care în general, în cristal nu se propagă paralel, ci parcurg drumuri diferite. La ieșirea din lamă, razele merg din nou paralel, așa că dacă raza de lumină este suficient de largă, iar lama suficient de subțire, atunci ele se pot propaga în aceeași direcție, suprapunîndu-se din nou.

Razele care au trecut prin polarizor și prin lama cristalină sînt paralele, coerente și au o diferență de drum, dar pentru ca să poată interfera, mai trebuie ca planurile lor de polarizare să coincidă. Tocmai în aceasta constă menirea analizorului : el aduce oscilațiile celor două raze în același plan. Mai exact, analizorul separă acele componente ale oscilațiilor, care se află în planul său de polarizare.

În absența unei lame cristaline, intensitatea luminii care iese din sistemul optic este dată de legea lui Malus,

$$I = I_0 \cos^2 \alpha; \quad (40.2)$$

aici α este unghiul dintre planurile de polarizare ale polarizorului și analizorului, I_0 fiind intensitatea luminii care trece prin polarizor. Dacă $\alpha = 0$, nicolii sînt paraleli, observîndu-se intensitatea maximă a luminii transmise. Dacă $\alpha = 90^\circ$, nicolii sînt „încrucișați” (planurile de polarizare ale polarizorului și analizorului sînt reciproc perpendiculare) (termenii de „nicoli încrucișați” și „nicoli paraleli” se utilizează prin tradiție și atunci cînd ca mijloace de polarizare se folosesc nu nicoli, ci polaroizi sau alte prisme), nu trece lumină prin sistemul optic, se observă extincția cîmpului optic.

Dacă între nicolii încrucișați se plasează o lamă cristalină birefringentă, atunci cîmpul optic se luminează. Gradul de iluminare depinde de valoarea birefringenței, aceasta din urmă, depinzînd, la rîndul ei, de constantele optice ale cristalului, de orientarea acestuia în raport cu axa optică a sistemului cît și de grosimea lamei cristaline.

Fenomenul de dublă refracție a luminii în cristale ca atare este, de regulă, destul de slab. Numai în cîteva cristale cu birefringență foarte puternică, cum ar fi calcitul (spatul de Islanda), salpetrul, se poate observa dubla refracție a luminii vizual. Interferența luminii polarizate creează condiții în care dubla-refracție apare deosebit de evident ca *polarizare cromatică (pleochroism) a luminii în cristale*: ca rezultat al interferenței razelor transmise printr-o lamă cristalină, lamele subțiri apar în lumina polarizată, în general, colorate în culori de interferență, vii. Culoarea depinde de nuanță, de diferența de drum din lamă, iar intensitatea culorii, de orientarea lamei față de planurile de polarizare ale polarizorului și analizorului.

O lamă tăiată perpendicular pe axa optică a cristalului va produce extincția luminii în cazul nicolilor încrucișați, exact ca o lamă dintr-o substanță optic izotropă. Dacă lama plan-paralelă nu este tăiată perpendicular pe axa optică a cristalului birefringent, ea va apărea luminată în lumină monocromatică, iar în lumina albă — colorată.

Fie, în figura 40.2, P și A direcțiile de oscilație din polarizor, și, respectiv, în analizor, care fac între ele unghiul γ , iar I și II direcțiile axelor principale ale elipsei după care se intersectează planul lamei cu indicatricea optică a cristalului. Ele fac cu P unghiurile α și $90^\circ - \alpha$, iar cu A unghiurile β și $90^\circ - \beta$, respectiv, astfel încît $\alpha + \beta + \gamma = 180^\circ$. Dacă OP reprezintă amplitudinea oscilațiilor luminoase transmise prin polarizor, atunci OM_1 și OM_2 vor fi amplitudinile de oscilație ale undelor luminoase, care se propagă prin cristal. Indicii de refracție ai acestor unde sînt notați cu n_1 și n_2 . Trecînd prin lama cristalină, undele capătă



diferența de fază

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} d(n_1 - n_2), \quad (40.3)$$

λ fiind lungimea de undă a luminii în vid, iar d grosimea lamei. În analizor, amplitudinile acestor unde se micșorează pînă la OA_1 și, respectiv OA_2 pe cînd diferența de fază dintre ele nu se modifică. Deci, intensitatea luminii care trece prin analizor este egală cu

$$I = (OA_1)^2 + (OA_2)^2 - 2 (OA_1) (OA_2) \cos \varphi. \quad (40.4)$$

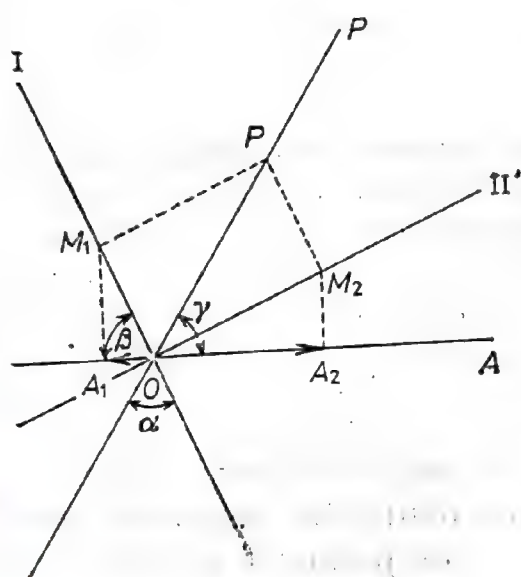


Fig. 40.2. Figura din care se deduce apariția diferenței de fază la trecerea luminii printr-o lamă cristalografică.

Dacă intensitatea luminii transmise prin polarizor este notată cu I_0 , atunci

$$OP = I_0^{1/2}, \quad OM_1 = I_0^{1/2} \cos \alpha, \quad OM_2 = I_0^{1/2} \sin \alpha, \quad OA_1 = I_0^{1/2} \cos \alpha \cos \beta, \quad OA_2 = I_0^{1/2} \sin \alpha \sin \beta.$$

Înlocuind aceste valori în (40.4), după transformări elementare obținem

$$I = I_0 \cos^2 \gamma + I_0 \sin 2\alpha \sin 2\beta \sin (\varphi/2). \quad (40.5)$$

În cazul nicolilor încrucișați, $\gamma = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ - \alpha$,

$$I = I_0 \sin^2 2\alpha \sin^2 (\varphi/2), \quad (40.6)$$

iar în cazul nicolilor paraleli, $\gamma = 0$, $\beta = 180^\circ - \alpha$,

$$I = I_0 - I_0 \sin^2 2\alpha \sin^2 (\varphi/2). \quad (40.7)$$

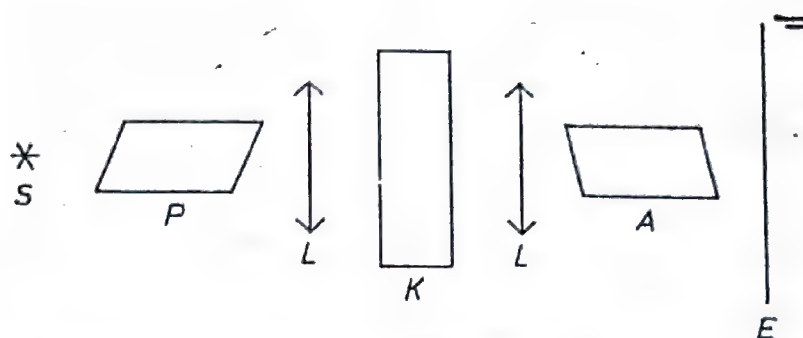


Fig. 40.3. Schema optică de observare a unui cristal în lumină polarizată convergentă : L , L — lentile condensoare ; restul notațiilor sînt cele din figura 40.1.

În cazul nicolilor încrucișați, conform condiției generale de interferență, se vor întări acele raze, pentru care diferența de drum,

$$\Delta = d(n_1 - n_2)$$

este egală cu un număr impar de semiunde. Dacă lama cristalină se află în poziție diagonală, astfel încît

$$\sin^2 2\alpha = 1,$$

fenomenul de interferență apare mai net, intensitatea colorației este maximă. La rotirea lamei cu o tură completă în jurul direcției fasciculului de lumină care trece prin ea, adică, în jurul axei optice a instalației de polarizare, de patru ori se va obține o extincție totală și tot de patru ori o colorație de intensitate maximă.

Deoarece expresiile (40.6) și (40.7) însumate îl dau pe I_0 , rezultă că în nicoli paraleli colorația va fi complementară : în poziție diagonală lama va fi viu colorată în culorile complementare, iar la o rotire completă, se vor găsi patru poziții, în care ea pare albă. Colorația depinde de grosimea și de orientarea plăcuței.

Cercetarea cristalelor în lumină polarizată, paralelă se utilizează pentru măsurarea dublei refracții, a grosimii unui cristal, în practica mineralogică și petrografică pentru diagnosticarea cristalelor, mai ales a rocilor.

Studiul cristalelor în lumină polarizată, convergentă permite să se determine orientarea și caracterul indicatriței optice, să se măsoare unghiul dintre axele optice ale unui cristal biax, să se determine semnul optic al cristalului, să se depisteze axele optice și rotația planului de polarizare, să se stabilească cantitativ și calitativ modificarea indicatriței optice sub influența acțiunilor exterioare (vezi efectul piezoelectric și efectul electrooptic, § 77).

Schema optică pentru studierea unui cristal în lumină polarizată, convergentă, este dată în figura 40.3. În afară de polari-

zorul P , analizorul A și cristalul C , un rol esențial îl au aici cei doi condensori, L . Totodată, drept sursă de lumină nu se mai ia o sursă punctuală, ca în schema din figura 40.1, ci o suprafață plană luminoasă care dă un fascicul larg de raze paralele (figura conoscopică, care se formează în planul focal al obiectivului microscopului de polarizare, se poate observa direct cu ochiul, îndepărtând ocularul și condensorul superior). După direcția axei optice a dispozitivului trece doar un singur fascicul, cel central, pe când celelalte, fiind înclinate față de această axă, vor traversa lama cristalină analizată sub diferite unghiuri, care sînt cu atît mai mari, cu cît fasciculul iese mai departe de centrul cîmpului optic.

Pe lama cristalină de studiat cade un fascicul convergent de raze polarizate, fiecare dintre ele descompunîndu-se în cristal în două raze cu planurile de oscilație perpendiculare între ele. Cea de a doua lentilă condensor concentrează aceste raze, focalizîndu-le în planul focal al obiectivului. Fiecare dintre fasciculele de raze paralele care trec prin lamă după o anumită direcție va fi focalizat într-un anumit punct din planul focal al obiectivului. La privirea acestui punct prin analizor, se va observa rezultatul interferenței din fasciculul de raze paralele considerat. În cîmpul vizual considerat în întregime se vede, dintr-odată, întreaga figură, care, în cazul cînd fasciculul este paralel s-ar putea observa succesiv, prin rotirea lamei în jurul axei verticale și a celei orizontale. Ca rezultat al interferenței fasciculelor de lumină ce traversează lama cristalină sub toate unghiurile posibile, apar figurile de interferență caracteristice, numite *figuri conoscopice*. Aspectul de ansamblu al figurilor conoscopice depinde atît de simetria cristalului (de categoria cristalografică), de orientarea indicatricei optice, de grosimea cristalului și de valoarea birefringenței cît și de apertura microscopului și de compoziția spectrală a luminii.

Figura conoscopică, observată în cazul nicolilor încrucișați, este formată din izogire și izocrome. Se numesc *izogire* benzile întunecate, formate în totalitatea punctelor ce corespund tuturor direcțiilor din cristal, după care se propagă razele, avînd oscilațiile paralele cu planurile de polarizare ale nicolilor încrucișați. *Izocromele* sînt zonele colorate în diferitele culori de interferență (la observarea în lumină albă), fiecare dintre ele corespunzînd direcțiilor pentru care diferența de drum este aceeași.

Dacă se rotește lama cristalină în jurul direcției razei, atunci izogirele își modifică de regulă forma și orientarea, pe cînd izocromele nu și le schimbă.

Figura conoscopică caracteristică unui cristal uniax, tăiat perpendicular pe axa optică, are aspectul unei cruci negre, formată din cele două izogire și o întreagă serie de cercuri izocrome

Fig. 40.4. Figura conosopică a unui cristal optic uniax, observată perpendicular pe axa optică.



colorate, concentrice (vezi fig. 40.4, în care izocromele sînt reprezentate prin zone albe și negre). La o rotație completă a lamei figura nu se schimbă.

Dacă normala la lamă face un unghi cu axa optică a cristallului, atunci centrul crucii izogirelor nu va mai coincide cu centrul cîmpului vizual, iar în cazul rotirii lamei, crucea va descrie un cerc în jurul centrului cîmpului vizual. Dacă unghiul dintre axa optică a lamei și rază este suficient de mare, atunci în cîmpul vizual se vede numai o singură izogiră, existînd unele poziții pentru care izogirile în general nu mai apar în cîmpul vizual al microscopului (fig. 40.5).

Pentru explicarea figurii conoscopice reprezentată în figura 40.4, observăm că în fiecare punct al său vibrațiile undei extraordinare sînt orientate după raza cercului, iar oscilațiile undei ordinare după tangentele la acesta. Acolo unde ambele direcții de oscilație sînt paralele cu direcțiile de oscilație din nicoli, se

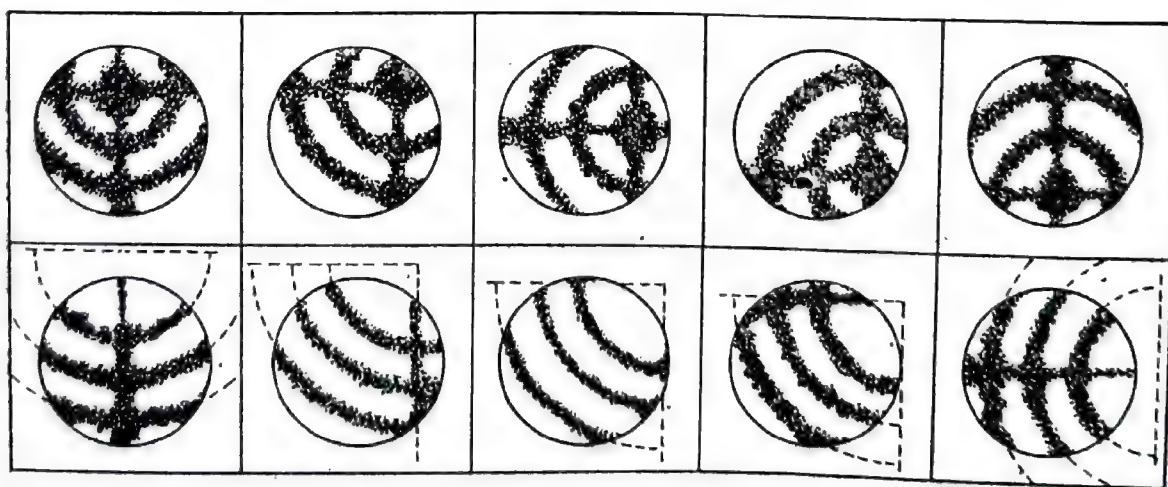


Fig. 40.5 Figura conosopică a unui cristal optic uniax, observată sub diferite unghiuri față de axa optică.

observă extincția, care dă tocmai crucea neagră. În centrul figurii $n_e = n_o$ valoarea dublei refracții, Δn , crescînd de la centru spre periferie, deoarece n_e diferă tot mai mult de n_o . În afară de aceasta, pe măsura creșterii unghiului de înclinare a razelor, crește lungimea drumului optic al ambelor raze din lamă. Diferența de drum

$$\Delta = \frac{d}{n_e - n_o}$$

crește de la centru spre margine, astfel încît ramurile crucii se lărgesc întrucîtva de la centru spre periferie. Cercurile colorate sînt cu atît mai dese cu cît lama este mai groasă și cu cît birefringența este mai mare.

După direcțiile care fac unghiul β cu axa optică, diferența de drum dintre raza ordinară și raza extraordinară, care au traversat lama de grosime d , va fi egală cu

$$\Delta = d(N_e - N_o) \sin^2 \beta. \quad (40.8)$$

Cercurile colorate ale izocromelor corespund condiției $\Delta = M_\lambda$, în care M este un număr întreg. Dacă grosimea lamei, $d = \text{const}$, atunci

$$\sin^2 \beta = \frac{M_\lambda}{d(N_e - N_o)}, \quad (40.9)$$

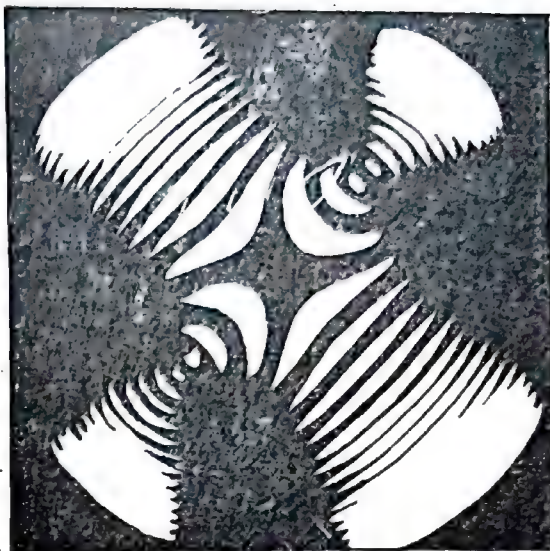
iar în cazul unui unghi β mic, punînd $\sin \beta \approx \beta$ avem

$$\beta_n \sim \sqrt{M}. \quad (40.10)$$

De aici se vede că suprafețele pentru care diferența de fază este egală reprezintă o serie de conuri coaxiale, ale căror secțiuni cu planul de observare dau o figură de tipul celor din figura 40.4 sau 40.5. Practic, valorile lui β nu cresc strict proporțional cu \sqrt{M} , din cauza faptului că pe măsura creșterii unghiului de înclinare, crește și d . Figurile conoscopice reprezentate în figura 40.5 se explică analog.

Figura conoscopică a unui cristal biax într-o secțiune perpendiculară pe bisectoarea ascuțită, în cazul poziției diagonale a lamei, este formată din două izogire și o serie de izocrome (fig. 40.6). Izocromele au în secțiune forma ovalelor lui Cassini, al căror caz particular îl constituie lemniscata. Izogirele au formă de hiperbole care diverg (fig. 40.6).

Fig. 40.6. Figura conoscoptică a unui cristal biax, observată perpendicular pe bisectoarea așezută.



Cele două puncte inconjurate de cercurile lemniscatelor corespund punctelor de ieșire ale axelor optice. În apropierea punctelor de ieșire ale axelor, lemniscatele sînt cercuri concentrice în jurul fiecăreia dintre axe, iar mai departe se contopesc în curbe sub formă de opt, comune pentru ambele axe.

Unghiul $2V$, dintre axele optice ale unui cristal biax, se poate măsura după figura conoscoptică, direct din distanța dintre punctele de ieșiri ale axelor optice ; la calcularea acestui unghi trebuie să se țină cont de diferența dintre valorile unghiurilor în interiorul cristalului și în aer.

Suprafața de aceeași diferență de fază a cristalului biax se construiește la fel ca pentru un cristal uniax.

După metoda lui Șubnikov, figura conoscoptică poate fi observată în lumină polarizată, paralelă, examinînd nu o lamă plan-paralelă, ci o sferă cristalină. În acest caz, sfera însăși joacă atît rolul de condensor cît și de obiectiv.

Se poate, de asemenea, observa figura conoscoptică, depunînd pe suprafața cristalului o semisferă de sticlă sau o picătură de lichid cu indicele de refracție mare. În practică, această metodă se utilizează pentru determinarea rapidă a orientării cristalului și evaluarea omogenității sale optice.

Proprietățile optice ale cristalelor, în special tensorii κ și η precum și indicele de refracție, n , depind de frecvența luminii, de temperatură și de alți factori. Acest fenomen se numește *dispersie* (dispersia de frecvență, dispersia de temperatură etc. ; în § 81 va fi examinată dispersia spațială). Cea mai importantă este dispersia de frecvență. Caracterul dispersiei tensorilor optici în cazul cristalelor cu simetrii diferite este esențial diferit. Astfel, în cazul cristalelor optic izotrope, ea se reduce la dispersia indicelui de refracție : $n = n(\omega)$. La cristalele optic uniaxe, depind de frecvență

ambii indici de refracție principali :

$$N_o = N_o(\omega), N_e = N_e(\omega).$$

În ciuda faptului că, pentru frecvențele la care cristalul este transparent, indicii de refracție cresc totdeauna cu frecvența,

$$dN_o/d\omega > 0 \text{ și } dN_e/d\omega > 0,$$

viteza acestei creșteri poate fi atît de diferită, încît la o anumită frecvență să se schimbe chiar semnul birefringenței. Pentru lumina de această frecvență, cristalul pare optic izotrop. Astfel, cristalele tetragonale de apofilit și de torbernit, în lumină roșie sînt optic pozitive, în lumină albastră — optic negative, în lumină verde — optic izotrope. Într-un cristal tetragonal de vezuvian, schimbarea de semn este inversă: el este optic pozitiv în lumină albastră și negativ în lumină roșie. Cristalul de tiogalat de argint (AgGaS_2) este optic pozitiv pentru lumina cu lungimea de undă mai mică de 497,4 nm (în vid), dar optic negativ pentru lumina cu lungimea de undă mai mare ca această valoare (Hobden, 1968). Pentru lumina cu $\lambda_0 = 497,4 \text{ } \mu\text{m}$, cristalul de tiogalat de argint se comportă ca un mediu optic izotrop (fig. 40.7) în ciuda simetriei sale tetragonale. Utilizarea acestui fenomen original este descrisă în § 81.

În cristalele optic uniaxe se observă dispersia atît a indicilor de refracție cît și dispersia birefringenței. Direcția axei optice în aceste cristale este însă determinată univoc de simetria cristalului (ea coincide totdeauna cu axa de simetrie principală) și deci nu suferă dispersie.

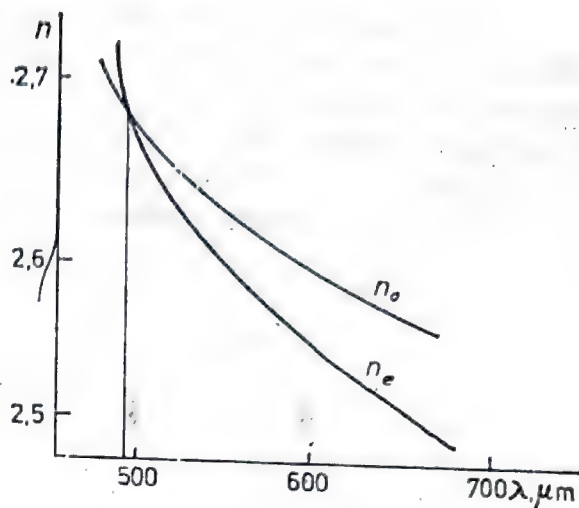
Cele mai variate manifestări ale dispersiei se observă la cristalele biaxe, fiind întrucîtva diferite în cristalele din sistemele diferite ale categoriei superioare.

În cristalele sistemului rombic este posibilă dispersia indicilor de refracție principali,

$$N_1 = N_1(\omega), N_2 = N_2(\omega), N_3 = N_3(\omega),$$

direcțiile axelor principale ale tensorilor $\kappa(\omega)$ și $\eta(\omega)$ fiind însă rigid legate de elementele de simetrie ale cristalelor (de axele de ordinul doi sau de normalele la planurile de simetrie) nu suferă dispersie. Direcțiile axelor optice din cristalele sistemului rombic în general vorbind sînt supuse dispersiei: cînd frecvența variază axele optice se rotesc una către cealaltă sau se îndepărtează una de cealaltă, rămînînd tot timpul în planul de simetrie al tensorilor

Fig. 40.7. Dispersia indicilor de refracție ai tiogalatului de argint (Hobden, 1968).



optici și totodată astfel încît bisectoarele unghiurilor dintre axele optice își păstrează direcția. Aceste modificări pot fi foarte mari. De exemplu, în cazul cristalelor Rb_2SO_4 unghiul $2V$ pentru lumina roșie este egal cu $36^\circ 25'$, iar pentru cea albastră, $61^\circ 50'$. Odată cu modificarea frecvenței, unghiul dintre axele optice poate trece de valoarea 90° ; la această frecvență cristalul biax își schimbă semnul. Un caz deosebit de interesant este cazul în care, în timpul variației frecvenței, unul dintre indicii de refracție principali devine egal cu celălalt. Pentru lumina de această frecvență, cristalul devine optic uniax : pozitiv, dacă la această frecvență $N_m = N_p$, negativ, dacă $N_m = N_g$. Însă particularitatea situației nu se limitează la aceasta. Este vorba de faptul că graficele $N_i = N_i(\omega)$, la această frecvență de regulă, se intersectează (este mult mai puțin probabil să fie tangente), și, din această cauză, de o parte și de cealaltă a punctului de intersecție, drept indici medii de refracție, N_m , sînt luați indicii de refracție principali care sînt însă diferiți (adică indici de refracție care corespund axelor principale care sînt diferite). Aceasta, însemnînd în continuare că pentru lumina de anumite frecvențe, drept plan al axelor optice va servi un plan de simetrie a cristalului, pe cînd pentru lumina de alte frecvențe, un alt plan.

În cazul cristalelor de brookit (modificarea rombică a TiO_2), pentru lumina roșie și lumina galbenă, planul axelor optice este (001), iar pentru lumina albastră (010). Pentru lumina cu $\lambda = 670$ nm unghiul dintre axele optice ale brookitului este $2V = 58^\circ$, pentru $\lambda = 535$ nm, $2V = 21^\circ 40'$, iar pentru $\lambda = 550$ nm, unghiul $2V = 0$, cristalul este optic uniax.

Dispersia indicilor de refracție se constată direct în figura conoscopică : marginile întunecate ale hiperbolei lîngă punctul de ieșire a axei optice capătă o irizare (tiv) colorată, ale cărei nuanțe, în regiunile convexă și concavă ale hiperbolei, sînt complementare.

La cristalele sistemului monoclinic, în afară de dispersia indicilor de refracție principali, mai există și o dispersie a axelor principale ale tensorilor optici κ și η ; deoarece dintre cele trei axe principale, două sînt totodată bisectoare ale unghiurilor dintre axele optice, această din urmă dispersie se mai numește *dispersia bisectoarelor*. În cazul cristalelor monoclinice, una dintre cele trei

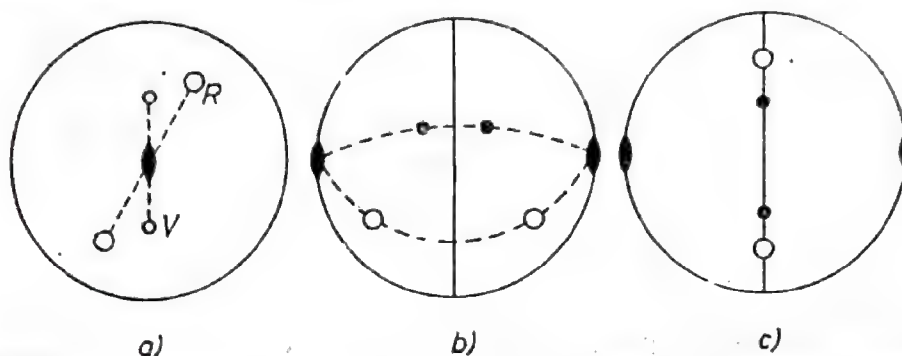


Fig. 40.8. Tipurile principale de dispersie a axelor optice și a bisectoarelor în cristalele monoclinice : a) dispersia în lumină convergentă, b) dispersie paralelă, c) dispersie oblică. Prin cerceulețe negre sînt reprezentate ieșirile axelor pentru lumina violetă (v), iar cu cerceulețe albe pentru roșie (r).

axe principale își păstrează direcția (cînd sistemul cristalografic de coordonate este luat ca de obicei, această direcție este $[010]$) iar celelalte două se rotesc în jurul ei, rămînînd în același plan (010) , perpendicular pe ea. Planul axelor optice ale unui cristal monoclinic, fie că coincide cu planul cristalografic (010) , fie că este perpendicular pe el; în cel de al doilea caz, odată cu variația frecvenței luminii, planul, de regulă, se rotește față de cristal. În consecință, în cristalele monoclinice sînt posibile două tipuri principale de dispersie a axelor optice, reprezentate schematic în figura 40.8.

În figura conoscopică, dispersia axelor optice se manifestă nu numai sub forma irizării colorate a conturilor izogirelor, ci și prin schimbarea coloritului lemniscatelor; în cadrul aceluiași inel, însă de părți diferite, față de axa optică, se observă o colorație diferită.

La cristalul monoclinic de ghips ($\text{CaSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) se manifestă extrem de intens dispersia de temperatură. La temperatura camerei planul axelor optice este perpendicular la planul (010) , unghiul dintre axele optice fiind $2V = 62^\circ$. Prin încălzire acest unghi se micșorează atît de repede, încît la temperatura de 116°C este deja egal cu zero, astfel încît cristalul devine optic uniax. Dacă cristalul se încălzește în continuare, axele optice încep să diveargă din nou, de data aceasta însă în planul (010) .

Caracterul dispersiei axelor optice se studiază de obicei analizînd figura conoscopică, într-o secțiune, după o direcție aproxi-

mativ perpendiculară pe bisectoarea ascuțită. În acest caz, modificările datorate dispersiei figurii conoscopice, cînd planul axelor optice este perpendicular la planul (010), sînt întrucîtva diferite de cazurile în care bisectoarea ascuțită coincide cu [010] față de situația cînd ea este perpendiculară la această direcție; primul caz este numit *dispersie încrucișată*, iar al doilea *dispersie orizontală* sau *paralelă*. În cazul în care unghiul dintre axele optice este apropiat de 90° , aceste diferențe dispar.

Asupra proprietăților optice ale cristalelor vezi Born (1937); Born și Wolf (1970); Born și Huang (1958); Ditchbern (1965); Karandeev (1913); Landau și Lifșit (1957); Landsberg (1957); Melanholin (1970); F. I. Fiodorov (1958); Șubnikov (1958); Pockles (1906); Ramachandran, Ramaseshnan (1961).

§ 41. TENSORII ȘI PSEUDOTENSORII DE RANG SUPERIOR

Pe lângă tensorii de rangul doi, în fizica cristalelor se utilizează și tensorii de rangul trei, patru și de rang și mai înalt. Ei se introduc prin aceleași procedee ca și tensorii de rangul doi. Fie, de exemplu, un vector P , ale cărui componente depind liniar de componentele unui tensor de rangul doi, σ

$$P_i = d_{lmn} \sigma_{mn}; \quad (41.1)$$

d_{lmn} sînt coeficienții dependenței liniare. Vectorul P și tensorul σ pot fi însă raportați și la un alt sistem, „nou”, de coordonate. Dacă $\|c_{i'l}\|$ este matricea de trecere de la sistemul de coordonate „vechi” la cel nou, atunci componentele vectorului P în noul sistem de coordonate sînt egale cu

$$P_{i'} = c_{i'l} P_l = c_{i'l} d_{lmn} \sigma_{mn}. \quad (41.2)$$

Să împărțim valorile componentelor σ_{mn} ale tensorului σ din sistemul de coordonate vechi prin valorile lor $\sigma_{j'k'}$ din sistemul nou

$$\sigma_{mn} = c_{j'm} c_{k'n} \sigma_{j'k'}. \quad (41.3)$$

Înlocuind σ_{mn} în formula (41.2), obținem

$$P_{i'} = c_{i'l} d_{lmn} c_{j'm} c_{k'n} \sigma_{j'k'}. \quad (41.4)$$

Dacă în sistemul vechi de coordonate dependența liniară a componentelor vectorului P de componentele tensorului σ se determină cu ajutorul unui set de coeficienți d_{lmn} , în noul sistem, aceeași dependență se determină cu ajutorul coeficienților

$$d_{i'k'} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} d_{lmn}. \quad (41.5)$$

La fel se deduce și formula pentru transformarea coeficienților d_{lmn} în cazul trecerii de la noul sistem la cel vechi

$$d_{lmn} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} d_{i'j'k'}. \quad (41.6)$$

Legile de transformare (41.5) și (41.6) sînt aceleași ca și pentru produsele componentelor a trei vectori. Prin urmare, avem de a face cu o anumită mărime geometrică, adică cu o mărime d , ce există independent de sistemul de coordonate și care, în orice sistem de coordonate se caracterizează printr-un set de numere, d_{lmn} ; la trecerea de la un sistem de coordonate la altul, aceste numere se transformă ca produsele componentelor a trei vectori. O asemenea mărime se numește *tensor de rangul trei*, iar numerele d_{lmn} și $d_{i'j'k'}$ sînt *componentele* acestui tensor în vechiul și, respectiv, în noul sistem de coordonate.

La noțiunea de tensor de rang trei se poate ajunge și în alt mod, și anume considerînd dependența liniară a componentelor unui tensor de rangul doi, ζ , de componentele unui vector, E

$$\zeta_{ij} = r_{ijk} E_k; \quad (41.7)$$

coeficienții r_{ijk} vor fi, de asemenea, componente ale tensorului r , tensor de rangul trei.

Aceleași procedee permit și introducerea tensorilor de rangul patru, cinci și de rang și mai înalt. De exemplu, coeficienții s_{ijkl} , care exprimă dependența liniară a componentelor ε_{ij} ale unui tensor ε în funcție de componentele σ_{kl} ale tensorului σ

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (41.8)$$

sînt componentele tensorului de rangul patru, s ; coeficienții Q_{ijklm} , care definesc dependența liniară a componentelor s_{ijkl} ale tensorului de rangul patru, s , de componentele E_m ale vectorului E

$$s_{ijkl} = Q_{ijklm} E_m, \quad (41.9)$$

sînt componentele tensorului de rangul patru, Q . Se poate formula o regulă generală: coeficienții dependenței liniare ai componentelor unui tensor de rangul r , de produsele componentele tensorilor de rangurile r_1, \dots, r_k , sînt componentele unui tensor al cărui rang este egal cu $r + r_1 + \dots + r_k$.

O altă operație matematică al cărei rezultat este apariția tensorilor o constituie diferențierea tensorilor în raport cu tensorii. Fie, de pildă, componentele vectorului P funcții de componentele tensorului σ . Să introducem pentru derivatele parțiale notația

$$\frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{mn}} = d_{lmn}, \quad (41.10)$$

iar pentru derivatele spațiale în noul sistem de coordonate

$$\frac{\partial P_{i'}}{\partial \sigma_{j'k'}} = d_{i'j'k'}. \quad (41.11)$$

După cum se poate arăta ușor,

$$d_{i'j'k'} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} d_{lmn}; \quad (41.12)$$

ceea ce înseamnă că d_{lmn} sînt componente ale unui tensor de rangul trei. Analog se tratează și problema diferențierii unui tensor în raport cu cîțiva tensori. Ca urmare, ajungem la următoarea regulă generală: derivatele parțiale ale unui tensor de rang r în raport cu componentele tensorilor de rangurile r_1, \dots, r_k sînt componente ale unui tensor al cărui rang este egal cu $r + r_1 + \dots + r_k$.

Tensorii de rang superior se pot scrie și ei sub formă fără coordonate, folosind vectorii bazei, ca de exemplu,

$$d = d_{lmn} e_l e_m e_n. \quad (41.13)$$

Trecerea la noua bază, adică înlocuirea vectorilor e_l prin combinațiile lor liniare

$$e_{l'} = c_{l'l} e_l$$

(unde $e_{l'}$ sînt, ca și vectorii e_l , ortonormați), ne conduce la rezultatul, ușor de demonstrat, că același tensor va căpăta forma

$$d = d_{i'j'k'} e_{i'} e_{j'} e_{k'}, \quad d_{i'j'k'} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} d_{lmn}, \quad (41.14)$$

ceea ce este în deplină concordanță cu formulele (41.5) și (41.12).

Regulile operațiilor cu tensorii sînt următoarele.

Înmulțirea cu un număr. *Produsul dintre tensorul A, care are componentele $A_{ij\dots k}$ (față de o anumită bază ortonormată, dată mai înainte, e_1, e_2, e_3) și un număr λ este tensorul de același rang, λA , ale cărui componente (față de aceeași bază) sînt $\lambda A_{ij\dots k}$.*

Adunarea tensorilor. *Suma a doi tensori de același rang, A și B, de componente $A_{ij\dots k}$ și $B_{ij\dots k}$ este tensorul de același rang, D, ale cărui componente vor fi*

$$D_{ij\dots k} = A_{ij\dots k} + B_{ij\dots k}.$$

Tensorii de rang diferit nu se pot aduna.

Înmulțirea tensorilor. *Produsul* dintre tensorul A , de rang p , avînd componentele $A_{i_1 \dots i_p}$ și tensorul B , de rang q , ale cărui componente sînt $B_{k_1 \dots k_q}$ este tensorul $D = AB$, de rang $p + q$, avînd componentele

$$D_{i_1 \dots i_p k_1 \dots k_q} = A_{i_1 \dots i_p} B_{k_1 \dots k_q}.$$

Ordinea factorilor este esențială: tensorul $F = BA$, în general nu este egal cu tensorul D . Aplicată vectorilor, această operație se numește *produs diadic*.

Formarea izomerilor. Permutînd, într-un mod oarecare, indicii tensorului D , obținem un tensor F , de același rang cu D ; F este unul dintre *izomerii* tensorului D . În particular, în cazul exemplului analizat mai sus, de înmulțire a tensorilor, tensorul $F = BA$ este izomerul tensorului $D = AB$

$$F_{k_1 \dots k_q i_1 \dots i_p} = D_{i_1 \dots i_p k_1 \dots k_q}.$$

Simetrizarea și alternarea. Tensorul B este *tensorul simetric* lui A , dacă el este egal cu media aritmetică a tuturor izomerilor posibili ai tensorului A ; tensorul B este *tensorul alternativ* lui A , dacă în media aritmetică menționată, izomerii obținuți prin permutarea pară a indicilor sînt luați cu semnul plus, iar cei obținuți prin permutarea impară, cu semnul minus. Simetrizarea și alternarea se notează scriind indicii între paranteze rotunde, respectiv pătrate. De exemplu,

$$B_{ijk} = A_{(ijk)} = \frac{1}{6} (A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} + A_{ikj} + A_{jik} + A_{kji}),$$

$$D_{ijk} = A_{[ijk]} = \frac{1}{6} (A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} - A_{ikj} - A_{jik} - A_{kji}).$$

Simetrizarea și alternarea sînt posibile și numai în raport cu o parte dintre indici, scriindu-se între paranteze, în acest caz, numai această parte. De exemplu,

$$A_{i(jk)} = \frac{1}{2} (A_{ijk} + A_{ikj}), \quad A_{[ij]k} = \frac{1}{2} (A_{ijk} - A_{jik}).$$

Contraecția tensorilor. Din tensorul A , al cărui rang este $r \geq 2$, se poate obține un tensor B , de rang $r-2$, dacă se efectuează însumarea componentelor tensorului A după o pereche oarecare de indici.

De exemplu, tensorul B , cu componentele $B_{ijk} = A_{ijkl}$ este rezultatul *contractiei* tensorului de rangul cinci în raport cu ultimii doi indici. În cazul alegerii altor indici de contracție, se obține un alt tensor de rangul trei, de exemplu, $D_{ijk} = A_{ilijk}$; în general, $D \neq B$. Contractia se combină adesea cu înmulțirea. De exemplu, în formula $P_i = d_{ijk} \sigma_{jk}$ este conținută înmulțirea tensorului d cu tensorul σ , urmată de dubla contracție ulterioară a tensorului rezultat, de rangul cinci.

În cadrul fiecăreia dintre definițiile enumerate este indispensabil în demonstrație cuvântul „tensor”: se cere să se demonstreze că setul de mărimi obținut ca rezultat al operațiilor respective se transformă la trecerea de la un sistem de coordonate la altul după o lege tensorială. Cu alte cuvinte, este necesar să se verifice dacă cele două căi duc sau nu la unul și același rezultat: 1) efectuăm operația respectivă (adunare, înmulțire, contracție etc.) asupra componentelor tensorilor în vechiul sistem de coordonate, iar după aceasta, considerind că mărimile obținute sînt componentele unui tensor, le raportăm la noul sistem de coordonate; 2) exprimăm componentele tuturor tensorilor dați în noul sistem de coordonate și numai după aceasta le aplicăm operațiile respective.

Să examinăm, de pildă, produsul dintre un tensor de rangul întâi A și un tensor de rangul doi, B :

$$\text{prima cale: } A_l B_{mn} = D_{lmn}, \quad D_{i'j'k'}^{(1)} = c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} D_{lmn};$$

$$\text{a doua cale: } A_{i'} = c_{i'l} A_l, \quad B_{j'k'} = c_{j'm} c_{k'n} B_{mn}, \quad D_{i'j'k'}^{(2)} = A_{i'} B_{j'k'};$$

Se cere să se demonstreze că $D_{i'j'k'}^{(1)} = D_{i'j'k'}^{(2)}$.

Pe lângă tensori, în fizica cristalelor se utilizează și *pseudotensorii*. Un tensor A de rang r este un set de 3^r mărimi, $A_{k_1 \dots k_r}$, care, la trecerea de la coordonatele vechi la cele noi, se transformă conform legii

$$A_{i'_1 \dots i'_r} = c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} A_{k_1 \dots k_r}, \quad (41.15)$$

unde $\|c_{i'k}\|$ este matricea transformării. Pseudotensorul B se deosebește de tensorul de același rang, A , prin faptul că la trecerea în noile coordonate componentele lui, $B_{k_1 \dots k_r}$, se înmulțesc suplimentar cu determinantul matricei transformării $\Delta = \det \|c_{i'k}\|$

$$B_{i'_1 \dots i'_r} = \Delta c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} B_{k_1 \dots k_r}. \quad (41.16)$$

Pseudotensorii de rang inferior, adică pseudoscalarul și pseudovectorul, au fost studiați în § 23.

§. 42. SIMETRIA INTERNĂ A TENSORILOR ȘI LEGĂTURA DUALĂ

În fizica cristalelor se utilizează adesea tensori de rang superior, simetrici în raport cu anumiți indici. Un tensor se numește tensor *simetric* în raport cu doi sau mai mulți indici, dacă toți

izomerii lui, care se deosebesc între ei prin permutarea tocmai a acestor indici, sînt egali între ei. Astfel, componentele unui tensor de rangul trei, simetric în raport cu ultimii doi indici, satisfac condiția

$$d_{ikl} = d_{ilk}, \quad (42.1)$$

componentele unui tensor de rangul trei, simetric în raport cu toți cei trei indici, condițiile

$$f_{ikl} = f_{ilk} = f_{kli} = f_{kil} = f_{lki} = f_{lik} \quad (42.2)$$

iar componentele unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu primii doi indici și cu ultimii doi indici, condițiile

$$p_{ijkl} = p_{jikl} = p_{ijlk} = p_{jilk} \quad (42.3)$$

În fizica cristalelor se întîlnesc și tensori simetrici în raport cu grupuri întregi de indici. Așa este, de exemplu, tensorul de rangul patru, în care se pot permuta nu numai indicii din prima și din cea de a doua pereche, ci se pot permuta și înseși perechile între ele

$$s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{jilk} = s_{klij} = s_{kijl} = s_{likj} = s_{ljkj}, \quad (42.4)$$

precum și tensorul în care se permută numai perechile de indici, însă nu se pot permuta indicii din cadrul perechii

$$n_{ijkl} = n_{klij} \quad (42.5)$$

Proprietatea unui tensor de a fi simetric (sau antisimetric) în raport cu anumiți indici sau grupuri de indici, se numește *simetrie internă* a tensorului. Faptul că simetria internă este într-adevăr o proprietate a unui tensor trebuie demonstrat. Demonstrațiile sînt însă simple; în fond ele se reduc la a arăta că dacă am găsit un anumit tip de simetrie internă, atunci raportînd tensorul la un anumit sistem tip de coordonate, vom găsi același tip de simetrie internă în orice alt sistem de coordonate.

Pentru evitarea unei exprimări verbale complicate a simetriei interne a tensorilor, fizicianul teoretician Jahn (Jahn, 1949) a propus un sistem de notare simplu și comod. Simetria internă a unui vector se notează cu litera V . Simetria internă a unui tensor de rang r se notează cu simbolul V^r , amintind astfel că componentele tensorului de rang r se transformă ca și produsele componentelor a r vectori.

Un tensor simetric de rangul doi se notează $[V^2]$ — acest simbol arătând că componentele tensorului dat se transformă ca produsele celor două componente ale unuia și aceluiași vector. În general, simetria internă a unui tensor de rang r , simetric în raport cu toți indicii, se notează cu $[V^r]$ — componentele lui se transformă ca produsele a r componente ale unuia și aceluiași vector. Astfel, simetria internă a unui tensor f , definită prin formula (42.2), se notează cu $[V^3]$. Dacă un tensor de rangul r este simetric în raport cu q indici, simetria lui internă se notează cu $[V^q] V^{r-q}$; de exemplu, simetria internă, exprimată de formula (42.1), se notează $V[V^2]$ (notația simetriei interne nu arată care anume sînt pozițiile ocupate de indicii în raport cu care tensorul este simetric; ea se referă la toți izomerii, iar în exprimarea verbală și în exemple s-a luat unul dintre aceștia, fie cel mai comod, fie cel utilizat cel mai frecvent în fizica cristalelor).

Se mai întîlnesc și notații mai complicate :

— $[V^2][V]^2$ sau simplu $[V^2]^2$ reprezintă simetria internă a unui tensor de rangul patru, care este simetric în raport cu prima pereche de indici și cu cea de a doua pereche de indici (formula (42.3));

— $[V^2]^3$ reprezintă simetria internă a unui tensor de rangul șase, simetric în raport cu prima, cu a doua și cu a treia pereche de indici;

— $[(V^2)^2]$ exprimă simetria internă a unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu permutarea unei perechi de indici (formula (42.5));

— $[[V^2]^2]$ arată simetria internă a unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu prima și a doua pereche de indici precum și în raport cu permutarea lor (formula (42.4)).

În toate cazurile exponentul rezultat al lui V este egal cu rangul tensorului.

Notația lui Jahn permite și descrierea simetriei interne a pseudotensorilor. Prefixul „pseudo” se notează cu ε : simetria internă a unui pseudovector (adică a unui vector axial, vezi § 23) se exprimă cu simbolul εV , a unui pseudotensor simetric de rangul doi prin simbolul $\varepsilon[V^2]$ etc. Simetria internă a unui scalar o vom nota cu simbolul 1; atunci simetria internă a unui pseudoscalar va fi notată desigur cu ε .

În fizica cristalelor tensorii simetrici de rang superior definesc, adesea, dependențe liniare în care participă tensori simetrici de rangul doi. De exemplu, tensorul cu simetria internă $V[V^2]$ (v. relația (42.1)) definește dependența liniară a unui tensor de rangul doi, $[V^2]$ de vectorul V

$$\varepsilon_{kl} = d_{ikl} E_i \quad (\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}), \quad (42.6)$$

iar tensorul $[V^2]^2$ (v. (42.3)) dependența liniară a unui tensor simetric de rangul doi, $[V^2]$ de un altul

$$\zeta_{ij} = p_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\zeta_{ij} = \zeta_{ji}, \quad \varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}). \quad (42.7)$$

Tensorii simetrici de rang superior se obțin și ca urmare a diferențierii în raport cu argumentele care sînt mărimi tensoriale. Astfel, diferențierea unei funcții scalare în raport cu vectorul V și cu tensorul simetric de rangul doi $[V^2]$ duce la tensorul $V[V^2]$ (v. (42.1))

$$d_{ikl} = - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial \sigma_{kl}} \quad (\sigma_{kl} = \sigma_{lk}); \quad (42.8)$$

diferențierea de două ori a unei funcții scalare în raport cu un tensor simetric de rangul doi, $[V^2]$ duce la un tensor cu simetrie internă $[[V^2]^2]$ (v. (42.2))

$$s_{ijkl} = - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_{ij} \partial \sigma_{kl}} \quad (\sigma_{ij} = \sigma_{ji}), \quad (42.9)$$

iar diferențierea de două ori în raport cu un tensor nesimetric de rangul doi, V^2 , la tensorul $[(V^2)^2]$ (v. 42.5))

$$n_{ijkl} = - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \gamma_{ij} \partial \gamma_{kl}} \quad (\gamma_{ij} \neq \gamma_{ji}). \quad (42.10)$$

Numărul componentelor independente ale unui tensor simetric este mai mic decît cel al unui tensor nesimetric. În timp ce un tensor V^3 are 27 (3^3) componente independente, tensorul $V[V^2]$ are 18 (6×3) (acest fapt rezultă deosebit de clar din formulele (42.6) și (42.8)), pe cînd tensorul $[V^3]$ are numai 10 componente independente (trei componente de la forma $f_{111} + 6$ componente de la forma $f_{122} + 1$ componentă de la forma f_{123}). Analog, tensorul V^4 are 81 (3^4) componente independente, iar pentru tensorul de forma $[V^2]^2$ numărul lor este de 36 (6^2), pentru tensorul de forma $[[V^2]^2]$ 21 [$6 \times (6 + 1)/2$], iar pentru tensorul de tipul $[(V^2)^2]$ 45 [$9 \times (9 + 1)/2$] componente independente.

Alături de tensorii simetrici se utilizează și tensorii antisimetrice (uneori în locul cuvîntului „antisimetric” se utilizează expresia „simetric oblic”). Un tensor este *antisimetric* în raport cu doi sau trei indici (în spațiul tridimensional tensorii antisimetrice în raport cu mai mult de trei indici sînt identic egali cu zero) dacă izomerii săi, care diferă între ei prin permutarea pară a acestor indici, sînt egali unul cu altul, pe cînd în cazul permutării impare, sînt antiegalii (egali în mărime, dar de semn contrar). După Jahn,

antisimetria tensorilor se notează analog simetriei, însă nu cu paranteze pătrate, ci cu acolade. De exemplu, simetria internă a unui tensor de rangul trei, antisimetric în raport cu primii doi indici se notează $V\{V^2\}$ sau $\{V^2\}V$ fiind definită prin egalitățile

$$\beta_{ijk} = -\beta_{jik}, \quad (42.11)$$

în timp ce simetria internă a unui tensor de rangul trei antisimetric în raport cu toți indicii săi se notează cu $\{V^3\}$ fiind definită prin egalitățile*

$$e_{ijk} = e_{jki} = e_{kij} = -e_{ikj} = -e_{jki} = -e_{kji}. \quad (42.12)$$

Acest tensor se remarcă prin aceea că el are numai o singură componentă independentă. Într-adevăr, dacă printre indici ar fi cel puțin doi indici egali, atunci componenta corespunzătoare ar fi egală cu zero, iar toate cele șase componente diferite de zero ar avea o permutare oarecare a numerelor 1, 2, 3, fiind deci legați între ei prin cele cinci egalități (42.12). Dacă, de exemplu, $e_{123} = 1$, atunci

$$e_{lmn} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } lmn = 123, 231, 312; \\ -1 & \text{pentru } lmn = 132, 213, 321; \\ 0 & \text{în celelalte cazuri.} \end{cases} \quad (42.13)$$

Prezintă interes comportarea componentelor tensorului e în cadrul transformărilor de coordonate. Dacă în sistemul vechi de coordonate aceste componente se determină cu formula (42.13), atunci în noul sistem, la care trecerea este dată de matricea $\|c_{i' i}\|$, ele vor fi egale cu

$$e_{i'j'k'} = c_{i'i} c_{j'j} c_{k'k} e_{lmn}.$$

Calculând această sumă pentru câteva valori ale indicilor $i'j'k'$ și comparînd-o cu mărimea $\Delta = \det \|c_{i' i}\|$, ne vom convinge că

$$e_{i'j'k'} = \begin{cases} \Delta & \text{pentru } i'j'k' = 123, 231, 312; \\ -\Delta & \text{pentru } i'j'k' = 132, 213, 321; \\ 0 & \text{în celelalte cazuri.} \end{cases} \quad (42.14)$$

* Notăția lui Jahn se bazează pe aplicarea notațiilor reprezentărilor după care se transformă tensorii respectivi; astfel, V^2 , $[V]$ și $\{V\}$ sînt puterile, simplă, simetrică și antisimetrică ale reprezentării vectoriale a lui V .

Pe de altă parte, compararea formulelor (42.13) și (42.14) arată că toate componentele tensorului e (sau, dacă este cazul, singura lui componentă independentă) prin trecerea la noul sistem de coordonate se înmulțesc cu determinantul matricei transformării, adică sînt pseudoscalari (compară cu relația (42.11)). Prin urmare, acest tensor este invariant față de toate rotațiile proprii posibile, adică față de grupul rotațiilor simetria lui este $\infty \infty$.

Simbolul Levi-Civita a fost definit în § 13 prin condiția

$$\sigma_{lmn} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } lmn = 123, 231, 312; \\ -1 & \text{pentru } lmn = 132, 213, 321; \\ 0 & \text{în celelalte cazuri,} \end{cases} \quad (42.15)$$

în orice sistem de coordonate. Compararea cu tensorul e arată că în acest caz δ trebuie să fie un pseudotensor de rangul trei, deoarece componentele lui, prin trecerea la un nou sistem de coordonate, se transformă după legea

$$\delta_{i'j'k'} = \Delta c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} \delta_{lmn}, \quad (42.16)$$

unde $\Delta = \det \|c_{i'l}\|$. Întrucît, în general, aceste componente nu se modifică la nici un fel de transformări ortogonale, grupul de simetrie al tensorului este grupul ortogonal $\infty \infty m$.

Cu ajutorul pseudotensorului Levi-Civita, legătura dintre un pseudoscalar și un tensor antisimetric de rangul trei poate fi exprimată analitic sub forma

$$e_{ijk} = \psi \delta_{ijk}, \quad \psi = \frac{1}{6} \delta_{ijk} e_{ijk}; \quad (42.17)$$

în care ψ este pseudoscalarul unitar, fiind egal cu $+1$ într-un sistem de coordonate drept și cu -1 într-un sistem de coordonate stîng.

Pseudotensorul Levi-Civita permite, de asemenea, să se stabilească corespondența inversă, dintre un vector axial, \vec{a} , și tensorul antisimetric de rangul doi, $\mathbf{A} = -\mathbf{A}^*$

$$A_{mn} = -\delta_{lmn} a_l, \quad a_l = -\frac{1}{2} \delta_{lmn} A_{mn}. \quad (42.18)$$

Această corespondență se păstrează pentru orice transformări ortogonale. Într-adevăr,

$$\begin{aligned} -\delta_{i'j'k'} a_{i'} &= -\Delta c_{i'l} c_{j'm} c_{k'n} \delta_{lmn} \Delta c_{i'p} a_p = \\ &= -c_{j'm} c_{k'n} \delta_{lmn} \delta_{lp} a_p = -c_{j'm} c_{k'n} \delta_{lmn} a_l = c_{j'm} c_{k'n} A_{mn} = A_{j'k'} \end{aligned}$$

(aici este folosită relația (42.16), identitățile $\Delta^2 = 1$ și $c_{i'l} c_{i'p} = \delta_{lp}$).

În fond, legătura dintre vectorul axial, \mathbf{a} , și tensorul antisimetric, \mathbf{A} , exprimată prin relațiile (42.18), constituie de fapt două forme de scriere ale aceluiași obiect geometric. Același lucru, se înțelege, se poate spune și despre un tensor e , cu simetria internă $\{V^3\}$ și un pseudoscalar ψ , legați între ei prin relațiile (42.17).

Relațiile (42.17), (42.18) și altele asemănătoare lor se numesc *relațiile dualității*: tensorul simetric de rangul doi este dual cu vectorul axial, tensorul antisimetric de rangul trei, cu un pseudoscalar, iar un pseudotensor antisimetric de rangul trei, cu un scalar.

Relațiile dualității se pot scrie foarte laconic și expresiv cu ajutorul codului Jahn: relația (42.17), de pildă, poate fi scrisă sub forma

$$\{V^3\} \sim \varepsilon, \quad (42.19)$$

iar relația (42.18), sub forma

$$\{V^2\} \sim \varepsilon V. \quad (42.20)$$

Avantajul deosebit al acestei forme de scriere îl constituie posibilitatea deducerii exclusiv formale a noilor relații ale dualității din relații deja cunoscute. Astfel, înmulțind ambele părți ale relației (42.19) cu ε și observînd că $\varepsilon^2 = 1$ (produsul dintre doi pseudoscalari este un scalar), obținem

$$\varepsilon\{V^3\} V \sim 1, \quad (42.21)$$

care nu este altceva decît relația de dualitate dintre pseudotensorul antisimetric de rangul trei și un scalar. Înmulțind cu V ambele părți ale relației (42.20), obținem

$$\{V^2\} V \sim \varepsilon V^2, \quad (42.22)$$

adică un tensor de rangul trei antisimetric în raport cu doi indici este dual cu un pseudotensor de rangul doi, în general nesimetric. Înmulțind ambele părți ale relației (42.20) cu ε , găsim

$$\varepsilon\{V^2\} \sim V, \quad (42.23)$$

deci un pseudotensor antisimetric de rangul doi este dual cu un vector polar obișnuit. Relațiile (42.22) și (42.23) se utilizează în teoria activității optice a cristalelor (v. § 81).

§ 43. SCRIEREA TENSORILOR FĂRĂ COORDONATE. OPERAȚIILE DIFERENȚIALE INVARIANTE ASUPRA TENSORILOR

Așa cum s-a remarcat în § 41, tensorii de rang superior se pot scrie într-o formă care nu folosește coordonatele. De exemplu, un tensor de rangul trei în scrierea fără coordonate capătă forma

$$\mathbf{d} = d_{ijk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k.$$

Scrierea fără utilizarea coordonatelor a înmulțirii unui tensor cu un număr și adunarea tensorilor nu mai necesită explicații. Înmulțirea tensorilor se va nota scriind tensorii care se înmulțesc în ordinea convenită, fără vreun semn între ele. Înmulțirea cu contragere ulterioară este firesc să fie notată prin semnul *produsului scalar*. Într-adevăr, dacă se convine că semnul produsului scalar înseamnă înmulțirea scalară a tensorului cu vectorii vecini, atunci produsul scalar dintre vectorul $\mathbf{P} = P_i \mathbf{e}_i$ și tensorul \mathbf{d} , de exemplu, va fi egal cu

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \cdot \mathbf{d} &= P_i \mathbf{e}_i \cdot d_{ijk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = P_i d_{ijk} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = \\ &= P_i d_{ijk} \delta_{ii} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = P_i d_{ijk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k. \end{aligned} \quad (43.1)$$

S-a obținut un tensor de rangul doi cu componentele $P_i d_{ijk}$.

Dacă însumarea s-ar fi făcut după ultimul indice al tensorului \mathbf{d} , tensorul corespunzător s-ar fi putut obține permutind factorii

$$\mathbf{d} \cdot \mathbf{P} = d_{ijk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \cdot P_l \mathbf{e}_l = d_{ijk} P_k \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j. \quad (43.2)$$

Dacă însă însumarea s-ar fi cerut să se facă după indicii mijlociu al tensorului \mathbf{d} , atunci de fapt nu am fi știut deloc să scriem această operație în forma fără coordonate. Din fericire, în cadrul scrierii relațiilor tensoriale, în fizica cristalelor se reușește evitarea unor astfel de situații. Ne salvează de ele simetria internă a tensorilor care se utilizează în fizica cristalelor. Într-adevăr, dacă un tensor \mathbf{d} ar fi simetric în raport cu toți indicii, atunci ar fi, în general, indiferent care dintre ei este considerat indice de însumare. Dacă însă tensorul \mathbf{d} este simetric în raport cu doi indici (să zicem al doilea și al treilea), acest fapt este deja suficient pentru a se putea scrie în forma fără coordonate toate tipurile posibile de contragere a acestui tensor cu un vector, deoarece însumarea după al doilea indice dă, în acest caz, același rezultat ca și însumarea în raport cu al treilea indice.

O generalizare naturală a produsului scalar a doi tensori, examinat mai sus (adică înmulțirea lor cu contragerea ulterioară în raport cu un indice al fiecărui tensor) este *produsul biscalar* al tensorilor, care se deosebește de produsul scalar prin faptul că contragerea se efectuează în raport cu doi indici de la fiecare tensor. Semnul produsului biscalar ($:$) indică faptul că cei doi vectori care se găsesc imediat la stînga după el se înmulțesc scalar cu cei doi vectori care se află imediat în dreapta sa. Dacă, de exemplu, $s = s_{ijkl} e_i e_j e_k e_l$ și $\sigma = \sigma_{mn} e_m e_n$, atunci produsul biscalar al acestor tensori va fi un tensor de rangul doi

$$\begin{aligned} \varepsilon &= s : \sigma = s_{ijkl} e_i e_j e_k e_l : \sigma_{mn} e_m e_n = \\ &= s_{ijkl} \sigma_{mn} e_i e_j (e_k \cdot e_m) (e_l \cdot e_n) = s_{ijkl} \sigma_{kl} e_i e_j. \end{aligned} \quad (43.3)$$

Componentele ε_{ij} ale produsului biscalar $s : \sigma$ vor fi deci egale cu

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}.$$

Produsul biscalar $\eta = \sigma : s$ are, evident, componentele $\eta_{kl} = \sigma_{ij} s_{ijkl}$.

Cu ajutorul semnelui produsului biscalar se pot scrie componentele tensorilor de rangurile trei și patru. De pildă, componentele unui tensor de rangul trei, d , și ale unui tensor de rangul patru, s , sînt egale respectiv cu

$$\begin{aligned} d_{ikl} &= e_i \cdot d : e_k e_l, \\ s_{ijkl} &= e_i e_j : s : e_k e_l. \end{aligned} \quad (43.4)$$

Produsul biscalar poate fi aplicat și tensorilor de rangul doi. De exemplu, componentele unui tensor de rangul doi, σ , pot fi scrise la fel de bine în oricare dintre următoarele trei forme

$$\sigma_{ij} = e_i \cdot \sigma \cdot e_j = \sigma : e_i e_j = e_i e_j : \sigma. \quad (43.5)$$

În cazul scrierii fără coordonate se utilizează și semnul \times ; el înseamnă înmulțirea vectorială cu vectorii vecini lui. De exemplu, produsul vectorial dintre tensorul $\sigma = \sigma_{ij} e_i e_j$ și vectorul $p = p_k e_k$ va fi, conform definiției, egal cu

$$\sigma \times p = \sigma_{ij} e_i e_j \times p_k e_k = \sigma_{ij} p_k e_i (e_j \times e_k),$$

și aplicînd identitățile $e_j \times e_k = \delta_{jk} e_l$ el capătă forma finală

$$\sigma \times p = \delta_{jkl} \sigma_{ij} p_k e_i e_l. \quad (43.6)$$

În fizica mediilor continue se utilizează foarte des operațiile diferențiale invariante: aplicarea operatorului gradient unui câmp scalar, $\varphi(\mathbf{r})$, notat $\text{grad } \varphi$, precum și a operatorului divergență, $\text{div } \mathbf{u}$, și a operatorului rotor, $\text{rot } \mathbf{u}$, unui câmp vectorial, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Operații analoage se aplică și mărimilor de dimensiuni tensoriale mai înalte. Vom utiliza în aceste cazuri aceleași notații, dar cu litere mari.

Gradientul câmpului vectorial $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ este un tensor de rangul doi, $\text{Grad } \mathbf{u}$, cu componentele

$$(\text{Grad } \mathbf{u})_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \quad (43.7)$$

Tensorul transpus lui, $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r}$, se numește *derivata câmpului vectorial \mathbf{u} în raport cu raza vectorială \mathbf{r}*

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (43.8)$$

Partea simetrică a fiecăruia dintre acești tensori se numește *deformația câmpului vectorial, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ și se notează $\text{Def } \mathbf{u}$*

$$\text{Def } \mathbf{u} = \frac{1}{2} \left(\text{Grad } \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right), \quad (\text{Def } \mathbf{u})_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (43.9)$$

Divergența câmpului tensorial $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$ este vectorul $\text{Div } \boldsymbol{\sigma}$ cu componentele

$$(\text{Div } \boldsymbol{\sigma})_j = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}. \quad (43.10)$$

Cînd este necesar să se diferențieze în raport cu al doilea indice, se utilizează divergența tensorului transpus, $\boldsymbol{\sigma}^*$

$$(\text{Div } \boldsymbol{\sigma}^*)_j = \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial x_k}. \quad (43.11)$$

Dacă un câmp tensorial, $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$ este definit în toate punctele suprafeței S , atunci integrala de suprafață

$$\oint_S \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS$$

se numește *fluxul câmpului tensorial* σ (uneori, fluxul tensorului σ) prin această suprafață. Dacă însă acest câmp este definit (și diferențiabil continuu) și pe întregul volum V , limitat de suprafața închisă S , atunci este valabilă *teorema lui Gauss-Ostrogradski*

$$\oint_S \mathbf{n} \cdot \sigma \, dS = \int_V \text{Div } \sigma \, dV, \quad (43.12)$$

adică fluxul unui câmp tensorial printr-o suprafață închisă este egal cu divergența totală a aceluiași câmp tensorial din volumul mărginit de această suprafață. Demonstrația teoremei Gauss-Ostrogradski, pentru câmpurile tensoriale, rezultă direct din demonstrația arhicunoscută a acestei teoreme pentru câmpurile vectoriale și de aceea nu o mai dăm aici.

În fine, *rotorul unui câmp tensorial* $\varepsilon(\mathbf{r})$ este un pseudotensor de același rang, $\text{Rot } \varepsilon$ avînd componentele

$$(\text{Rot } \varepsilon)_{ii} = \delta_{ijk} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j}. \quad (43.13)$$

$\text{Rot } \varepsilon$ se poate considera ca produsul vectorial: $\text{Rot } \varepsilon = \nabla \times \varepsilon$. Atunci cînd trebuie să se diferențieze în raport cu al doilea indice, se utilizează $\text{Rot } \varepsilon^*$.

În mecanica mediilor continue o largă utilizare o are operația de diferențiere de ordinul al doilea — rotorul transpus al câmpului tensorial $\varepsilon(\mathbf{r})$. Acest câmp tensorial

$$\text{Ink } \varepsilon = \text{Rot } (\text{Rot } \varepsilon)^* \quad (43.14)$$

are același rang ca și cel inițial și se numește *incompatibilitatea câmpului tensorial* $\varepsilon(\mathbf{r})$. Componentele lui sînt egale cu

$$(\text{Ink } \varepsilon)_{ij} = \delta_{ikm} \delta_{jln} \frac{\partial^2 \varepsilon_{mn}}{\partial x_k \partial x_l}. \quad (43.15)$$

§ 44. SIMETRIA EXTERIOARĂ ȘI REPREZENTAREA TENSORILOR ȘI PSEUDOTENSORILOR

Tensorii de material definesc proprietățile cristalului. Fie un sistem cartezian de coordonate legat de un cristal. Setul de componente ale tensorului de material, în acest sistem de coor-

donate, caracterizează numeric proprietatea respectivă. Să supunem sistemul de coordonate unei transformări ortogonale. Componentele tensorului de material în „noul” sistem de coordonate, în general vorbind, nu mai sînt egale cu componentele lui de același nume din „vechiul” sistem. Însă dacă transformarea dată face parte din grupul de simetrie al cristalului, atunci componentele tensorului de material față de noul sistem vor coincide cu componentele din vechiul sistem. Într-adevăr, dacă două sisteme de coordonate sînt legate între ele printr-o transformare de simetrie a cristalului, poziția lor față de cristal este, în esență, aceeași. Prin urmare, *un tensor de material al unui cristal este invariant față de toate transformările de simetrie ale acestui cristal.*

Să formulăm această concluzie analitic. Fie A un tensor de material de rang r , iar $\|c_{i'k}\| = \|c_{i'k}(g)\|$ matricea unei transformări oarecare de simetrie a cristalului, g , a cărei proprietate este exprimată de acest tensor. Să supunem cristalul transformării g . În noul sistem de coordonate componentele tensorului capătă forma

$$A_{i'_1 \dots i'_r} = c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} A_{k_1 \dots k_r}. \quad (44.1)$$

Însă deoarece g este o transformare de simetrie a cristalului, componentele tensorului, în noul sistem de coordonate, trebuie să coincidă cu componentele lui în vechiul sistem. Aceasta se poate scrie în felul următor

$$A_{i'_1 \dots i'_r} = \delta_{i'_1 k_1} \dots \delta_{i'_r k_r} A_{k_1 \dots k_r}. \quad (44.2)$$

Comparînd (44.1) cu (44.2), obținem

$$(c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} - \delta_{i'_1 k_1} \dots \delta_{i'_r k_r}) A_{k_1 \dots k_r} = 0, \quad (44.3)$$

aceste 3^r egalități fiind necesar să fie satisfăcute pentru orice matrice $\|c_{i'k}(g)\|$, de îndată ce g este una dintre transformările de simetrie ale cristalului. Prin urmare, egalitățile (44.3) reprezintă un sistem de ecuații liniare, pe care trebuie să le satisfacă componentele tensorului A , dacă acest tensor descrie proprietățile cristalului.

Numărul de ecuații din sistemul (44.3) este egal cu ordinul grupului punctual al cristalului, înmulțit cu 3^r , numărul ecuațiilor independente fiind însă cu mult mai mic: dacă tensorul A satisface ecuația (44.3) pentru matricele care corespund generatoarelor (elementelor generatoare) ale grupului punctual al cris-

talului, atunci el satisface și toate celelalte ecuații (relativ la generatoarele grupului punctual, v. § 5). Într-adevăr, dacă un tensor este invariant față de transformările g_1 și g_2 , el este, evident, invariant și față de toate gradele și produsele posibile ale acestor transformări.

Pentru un pseudotensor de material, **B**, formula (44.3) trebuie întrucâtva modificată. În noul sistem de coordonate componentele pseudotensorului **B** sînt egale cu

$$B_{i'_1 \dots i'_r} = \Delta c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} B_{k_1 \dots k_r}, \quad (44.4)$$

Δ fiind determinantul matricei cosinușilor $\|c_{ik'}\|$. Formula (44.2) rămîne valabilă și pentru pseudotensori. Comparînd (44.2) cu (44.4), obținem în loc de (44.3) formula

$$(\Delta c_{i'_1 k_1} \dots c_{i'_r k_r} - \delta_{i'_1 k_1} \dots \delta_{i'_r k_r}) B_{k_1 \dots k_r} = 0. \quad (44.5)$$

Să examinăm mai întîi efectul existenței în cristal a unui centru de simetrie asupra tensorilor de material. În acest caz tensorii de material trebuie să fie invarianți față de inversie. Matricea cosinușilor corespunzătoare inversiei este $c_{i'k} = -\delta_{i'k}$, iar determinantul ei, $\Delta = -1$. Înlocuind pe $c_{i'k}$ în formula (44.3), obținem

$$[(-1)^r - 1] \delta_{i'_1 k_1} \dots \delta_{i'_r k_r} A_{k_1 \dots k_r} = 0. \quad (44.6)$$

Rezultatul depinde de faptul că rangul tensorului r este par sau impar. Pentru r par avem identitatea

$$0 \cdot A_{i'_1 \dots i'_r} = 0,$$

care este satisfăcută pentru orice tensor **A**. Prin urmare, toți tensorii de rang par sînt invarianți față de inversie, sau, cu alte cuvinte, au un centru de simetrie. Pentru r impar însă

$$-2A_{i'_1 \dots i'_r} = 0.$$

Aceasta înseamnă că în cazul existenței unui centru de simetrie în cristal, toți tensorii de material de rang impar se anulează; altfel spus, cristalele cu centru de simetrie nu posedă nici o proprietate caracterizată de tensorii de rang impar.

Dacă se ia nu un tensor, ci un pseudotensor, atunci, datorită faptului că în formula (44.5) intră factorul Δ , egal, în cazul inversiei, cu -1 , în formula (44.6) va trebui schimbat r prin $r + 1$. De aceea, toți pseudotensorii de material de rang impar au centru de simetrie; dimpotrivă, toți pseudotensorii de material de rang par, pentru cristalele care au centru de simetrie, se anulează.

În legătură cu rezultatele obținute în cadrul rezolvării acestei probleme este convenabil să introducem o nouă clasificare a tensorilor. Tensorii propriu-ziși de rang par și pseudotensorii de rang impar sînt denumiți *tensori de tip par*; toți aceștia, după cum s-a arătat, sînt invariante față de inversie. Tensorii propriu-ziși de rang impar și pseudotensorii de rang par se numesc *tensori de tip impar*; examinînd relația legăturii duale (§ 42), am văzut că una și aceeași mărime poate fi considerată și ca tensor propriu-zis și ca pseudotensor. De aceea, afirmînd despre o mărime oarecare că ea este, să zicem, un pseudotensor, noi precizăm de fapt nu această mărime însăși, ci numai metoda de a o scrie. Dimpotrivă, paritatea sau imparitatea constituie într-adevăr o proprietate esențială propriu-zisă a mărimii. De exemplu, rotațiile infinitesimale ale mediului continuu (v. § 49) pot fi descrise atît printr-un vector axial, $\vec{\phi}$, cît și folosind tensorul antisimetric — dualul său — de rangul doi, ω , însă în ambele procedee de exprimare a acestei mărimi utilizăm tensori tot de același tip, și anume de tip par.

Pentru că toți tensorii de material de tip par au simetrie centrală prin însăși natura lor, ei nu „sesizează” dacă un cristal are sau nu centru de simetrie. Dacă adăugăm mintal operațiilor de simetrie ale unui cristal o inversie (precum și produsele dintre inversie și toate operațiile de simetrie), aceasta nu impune nici un fel de restricții noi formei unui tensor de material de tip par. De aici rezultă că în raport cu simetria proprietăților descrise cu ajutorul tensorilor de tip par, cristalele se subîmpart nu în clase cristalografice, ci numai în clase Laue sau subsisteme (reamintim că grupurile punctuale ale tuturor claselor cu centru de simetrie făcînd parte dintr-un anumit subsistem, trec, după adăugarea la ele a elementelor generatoare de inversie, în grupul punctual al unicei clase cu centru de simetrie, a aceluiasi subsistem). Astfel, numărul varietăților proprietăților de simetrie de tip par, pentru toate cristalele posibile, nu depășește 11, iar dacă se iau în considerație și mediile cu simetrie maximă — 14.

Proprietăți de tip impar pot avea, așa cum s-a remarcat, numai cristalele cu centru de simetrie; numărul de varietăți de simetrie a acestor proprietăți nu depășește, din această cauză, numărul de grupuri punctuale cristalografice, care nu posedă un



centru de simetrie, adică 21; dacă se consideră și grupurile limită, acest număr crește la 25.

Tensorul de material al unui cristal este invariant față de toate transformările de simetrie ale cristalului, însă, în general, nu este invariant numai față de ele. De pildă, un tensor de material de tip par este invariant față de inversie chiar și atunci când cristalul a cărui proprietate o descrie, nici nu are un centru de simetrie. Apoi, analizând diferite aspecte din fizica cristalelor cu ajutorul principiului Curie, trebuie știut față de care anume dintre operațiile de simetrie este invariant unul sau altul dintre tensorii de cîmp. A. V. Șubnikov a introdus noțiunea de *simetrie a unui tensor*, utilizabilă atât în cazul tensorilor de material, cît și în cel al tensorilor de cîmp (Șubnikov, 1949; v. și Jeludev, 1957, și Koptîk, 1958) (ulterior, noțiunea a fost denumită *simetrie exterioară*, spre deosebire de cea internă): grupul de simetrie exterior al unui tensor este mulțimea tuturor transformărilor ortogonale față de care este invariant tensorul dat.

Metoda directă de determinare a simetriei exterioare a unui tensor a fost propusă de L. I. Sedov și V. V. Lohin (Lohin și Sedov — 1963 — sau Sedov — 1970 — anexa I; v. și Maloletkin și Fomin — 1972). Ei consideră ansamblul formulelor fundamentale ale teoriei simetriei exterioare a tensorilor, (44.3), ca pe un sistem de ecuații în elementele matriceale, $c_{i'k}$, tensorul A considerîndu-l dat. Fiecare soluție a acestui sistem este o matrice a transformării față de care este invariant tensorul A . Printre matricele care satisfac ecuația (44.3) pot fi și unele neortogonale; conform definiției simetriei exterioare a unui tensor, rezultă că matricele neortogonale nu trebuie luate deloc în considerație*. Matricele ortogonale rămase compun grupul simetriei exterioare a tensorului A .

În principiu, această metodă permite deducerea grupului simetriei exterioare a oricărui tensor, dat prin componentele sale într-un sistem de coordonate arbitrar, însă aplicarea lui nu este tocmai ușoară: ecuațiile (44.3) sînt liniare numai în raport cu componentele tensorului $A_{k_1 \dots k_r}$, iar față de elementele matriceale $c_{i'k}$ acestea sînt niște ecuații de gradul r (r este rangul tensorului).

L. I. Sedov și V. V. Lohin au demonstrat că oricare grup cristalografic și limită poate fi definit ca un grup de simetrie exterioară al unui tensor oarecare sau ca intersecția (partea comună) grupurilor de simetrie exterioară a citorva tensori.

* Într-un articol al lui Lohin și Sedov (1963) sînt examinate toate grupurile de transformări care determină tensorul dat, chiar dacă în el intră și transformări neortogonale (întînderile, deplasările etc.). Pentru scopul nostru este suficient totuși să se examineze numai subgrupul ortogonal al acestui grup. Comparați cu Vakulenko (1972).

Tensorii de material ai cristalelor depind de temperatură, de frecvență și de alți parametri scalari. Din această cauză, în afară de simetriile exterioare ale tensorilor de material în fizica teoretică a cristalelor este studiată și simetria exterioară a *funcției-tensorilor de material* — funcții-tensori de parametri scalari (asupra simetriei funcției-tensorilor, v. și Koptik, 1966). Unui set de parametri scalari, $\omega_1, \omega_2, \dots$ îi corespund tensori de material diferiți, $A(\omega_1), A(\omega_2), \dots$. Grupurile lor de simetrie, $G(A(\omega_1)), G(A(\omega_2)), \dots$ conțin, de regulă, aceleași elemente de simetrie, orientarea lor pentru diferiți tensori putînd fi însă diferită. Se numește *grup de simetrie exterioară*, $G^{(\omega)}(A)$ al funcției-tensor de material, $A(\omega)$, intersecția (partea comună) acestor grupuri

$$G^{(\omega)}(A) = G(A(\omega_1)) \cap G(A(\omega_2)) \cap \dots = \bigcap_i G(A(\omega_i)). \quad (44.7)$$

În grupul $G^{(\omega)}(A)$ al simetriei exterioare pentru funcția-tensor $A(\omega)$ intră acele și numai acele transformări care transformă tensorul A în sine însuși, pentru orice valori ale parametrilor. Pe de altă parte, conform principiului Neumann, toate elementele unui grup punctual de simetrie al unui cristal, G , trebuie să intre în grupul de simetrie exterioară al tuturor tensorilor de material ai acestui cristal și deci și în grupul de simetrie al funcției-tensorilor de material. De aici rezultă relația dedusă de Koptik (1966) dintre grupurile de simetrie ale cristalului, G , tensorul de material $G(A)$, și funcția-tensor de material, $G^{(\omega)}(A)$,

$$G(A) \supseteq G^{(\omega)}(A) \supseteq G. \quad (44.8)$$

Să examinăm cîteva exemple. Toți vectorii de material ai cristalelor care au axă de simetrie sînt orientați după această axă și, din această cauză, simetria, nu numai a fiecărui vector de material separat, ci și mulțimea tuturor vectorilor de material posibili, este egală cu ∞m . Însă vectorii de material ai unui cristal din clasa m pot lua orice direcție, care se află în planul de simetrie, ceea ce face ca simetria fiecărui vector în parte să fie, ca și pînă acum, ∞m , totuși simetria mulțimii lor este în total m .

Analog, fiecare tensor de material $[V^2]$ al unui cristal din orice clasă a sistemului monoclinic luat aparte are simetria mmm , însă întreaga mulțime a acestor tensori prezintă numai o singură axă de simetrie comună de ordinul doi și un singur plan de simetrie comun, astfel încît grupul de simetrie al acestei mulțimi va fi $2/m$.

Să trecem la analiza metodelor de reprezentare a tensorilor și pseudotensorilor de orice rang. În § 22 sînt prezentate cele două tipuri de suprafețe, prin care se reprezintă tensorii simetrici de rangul doi: caracteristicile și suprafețele indicatoare. Pentru reprezentarea tensorilor de rang superior se utilizează de obicei numai suprafețele. În coordonate polare ecuația unei suprafețe a unui tensor simetric \mathbf{T} , de rangul p , are forma

$$r(\theta, \varphi) = T_{i_1 \dots i_p} n_{i_1} \dots n_{i_p} \quad (44.9)$$

$$(n_1 = \sin \theta \cos \varphi, n_2 = \sin \theta \sin \varphi, n_3 = \cos \theta).$$

Dacă se înlocuiesc în această ecuație componentele tensorului sau pseudotensorului \mathbf{A} , a cărui simetrie internă nu este egală cu $[V^p]$ sau $\varepsilon[V^p]$, forma suprafeței va fi afectată numai de partea simetrică a acestuia, $T_{i_1 \dots i_p} = A_{(i_1 \dots i_p)}$, deoarece

$$A_{i_1 \dots i_p} n_{i_1} \dots n_{i_p} = T_{i_1 \dots i_p} n_{i_1} \dots n_{i_p}.$$

Așa cum s-a remarcat (§§ 22, 24), suprafața unui tensor poate consta din părți albe (pozitive) și părți negre (negative): primele corespund valorilor pozitive ale lui r , celelalte, valorilor negative. Unele dintre suprafețele reprezentate în § 24 sînt suprafețe ale tensorilor de rang superior. De exemplu, suprafețele coeficientului de întindere (figurile 24.5 — 24.11) sînt, de fapt, suprafețe ale unui tensor de material, de rangul patru, $s_{ijkl}^{(4)} = s_{(ijkl)}$, s fiind tensorul de deformabilitate elastică (v. §§ 51—53), iar suprafețele coeficientului de torsiune (figurile 24.6, 24.10, 24.11) sînt ale tensorului de material $Q_{ijkl} = 2(Z_{ik}\delta_{jl} - s_{ijkl})$, unde $Z_{ik} = s_{imkm}$ (comparați cu formulele (54.20) și (54.21)). Un mare număr de suprafețe de acest fel precum și secțiunile și proiecțiile lor stereografice (v. § 24) sînt date în capitolele ce urmează: figurile 54.3 — 54.10, 56.4, 58.1 — 58.3, 75.1 ș.a.

Să comparăm suprafețele tensorilor de tip par cu cele ale tensorilor de tip impar. Deoarece tensorii de tip par au centru de simetrie, la fel sînt și suprafețele lor: $r(\mathbf{n}) = r(-\mathbf{n})$. Din această cauză, orice diametru al suprafeței unui tensor de tip par constă din două raze egale ca mărime, corespunzînd aceluiași semn (fig. 44.1, a); simetria lui este ∞/mm .

Tensorii de tip impar sînt anticentrosimetrici: prin inversie ei își schimbă semnul (de acest fapt este legată antisimetria acestor suprafețe; vezi §§ 67, 68); la fel sînt și suprafețele lor: $r(\mathbf{n}) = -r(-\mathbf{n})$. Orice diametru al unei astfel de suprafețe constă

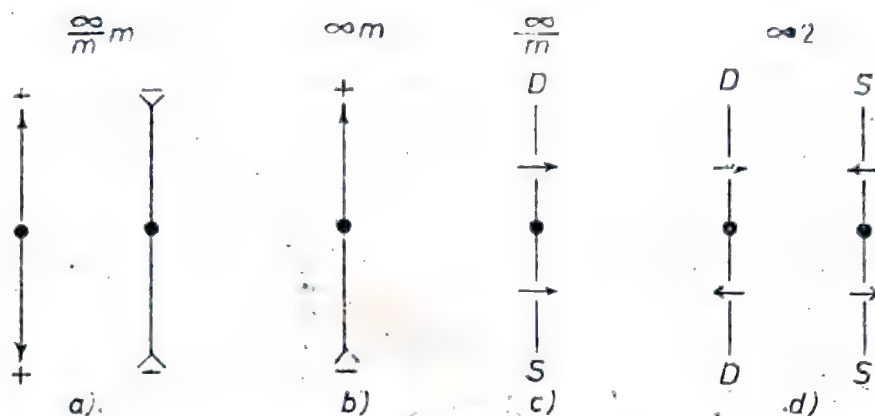


Fig. 44.1. Diametrele suprafețelor : a) a unui tensor propriu-zis de tip par ; b) a unui tensor propriu-zis de tip impar ; c) a unui pseudotensor de tip par ; d) a unui pseudotensor de tip impar. Diametrele b), c) și d) reprezintă direcțiile polară, axială și, respectiv, elicoidală. Punctul desemnează centrul suprafeței. Semnele plus și minus corespund culorii albe, respectiv, negre, la capătul diametrului dat, iar literele D și S rotației drepte, respectiv, stângi. V. Șubnikov (1958, fig. 117) și Șubnikov și Koplîk (1972, fig. 74).

din două raze egale ca mărime, dar de semne contrare (fig. 44.1, b) ; simetria lui este ∞m . Direcțiile din cristal a căror simetrie nu depășește ∞m se numesc *direcții polare* (v. § 3 și anexa C). Din principiul Curie rezultă că diametrele suprafețelor tensorilor de material de tip impar pot fi diferite de zero numai după acele direcții care în cristalul dat sînt direcții polare. Două proiecții stereografice și o secțiune a suprafeței efectului piezoelectric longitudinal dintr-un cristal de turmalină (clasa $3m$) sînt date în figura 44.2 ; aceasta este suprafața tensorului de material de rangul trei, $f_{ijk} = d_{(ijk)}$, unde d este tensorul coeficienților piezoelectrici (v. § 58).

Suprafețele pseudotensorilor simetrici sînt date tot de ecuația (44.9), însă razele vectoriale ale acestor suprafețe se transformă evident, nu după o lege vectorială, ci după una pseudovectorială, adică sînt vectori axiali. De aceea, fiecărui punct al suprafeței pseudotensorului i se atribuie nu un semn (ca punctelor suprafețelor tensorilor propriu-ziși), ci o rotație în sensul în care se rotește raza vectorială a punctului considerat. Convenim să numim acest punct al suprafeței pseudotensorului *punct dextrogir*, dacă, privindu-l din exteriorul suprafeței, rotația ne apare în sens contrar mersului acelor de ceas (respectiv, privindu-l dinăuntru, adică de-a lungul razei vectoriale — în sensul mersului acelor de ceas) și *punct levogir*, în cazul contrar.

Să comparăm acum suprafețele unui pseudotensor de tip par cu suprafețele unuia de tip impar. Suprafețele pseudotensorilor

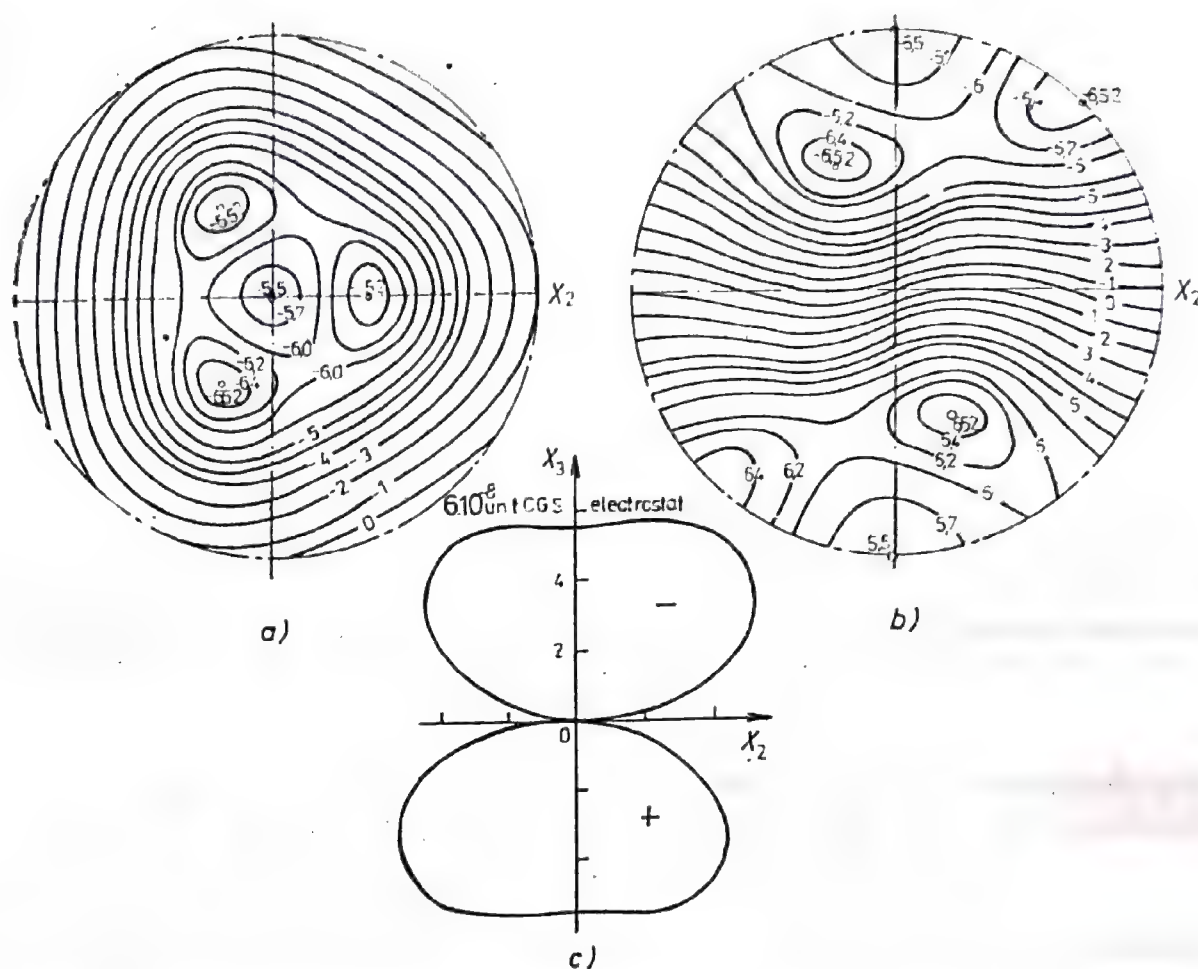


Fig. 44.2. Suprafața efectului piezoelectric longitudinal într-un cristal de turmalină (clasa $3m$) — exemplu de suprafață a unui tensor de tip impar : a) proiecția stereografică, din centrul proiecției iese axa X_3 — $[0001]$; b) aceeași suprafață, numai că d în centru iese axa X_1 — $[2\bar{1}\bar{1}0]$; în 10^{-8} unități CGSE ; c) secțiune a suprafeței cu planul X_2X_3 — (2110) . Grupul de simetrie a suprafeței este $3m$, grupul de antisimetrie fiind $3\bar{m}$ (v. § 68) (Butabaev, 1973).

de tip par (adică de rang impar) au centru de simetrie. Înseamnă că fiecare diametru al unei astfel de suprafețe constă din două raze egale ca mărime și cu același sens de rotație (fig. 44.1, c) ; simetria lui este ∞/m . Direcțiile din cristal ale căror simetrii nu depășesc ∞/m se numesc *direcții axiale*, astfel încât diametrele suprafețelor pseudotensorilor de material, de tip par, sînt diferite de zero numai în direcțiile axiale. Un exemplu de suprafață de acest tip este dat în figura 44.3.

Diametrele suprafețelor de tip impar constau din raze egale ca lungime, dar cu sensuri de rotație contrare (fig. 44.1, d) ; simetria lor este $\infty 2$. Direcțiile din cristale avînd această simetrie sau una mai mică se numesc *direcții elicoidale* ; diametrele suprafețelor pseudotensorilor de material de tip impar sînt diferite de zero numai după direcțiile elicoidale. Un exemplu de suprafață a unui pseudotensor de tip impar este dat în figura 44.4. Aceasta

este suprafața unui pseudotensor de rangul doi, cu simetria $\bar{4}2m$, a cărei matrice, în sistemul $X_1X_2X_3$, are forma

$$\|G_{ij}\| = \begin{vmatrix} -G & 0 & 0 \\ 0 & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (44.10)$$

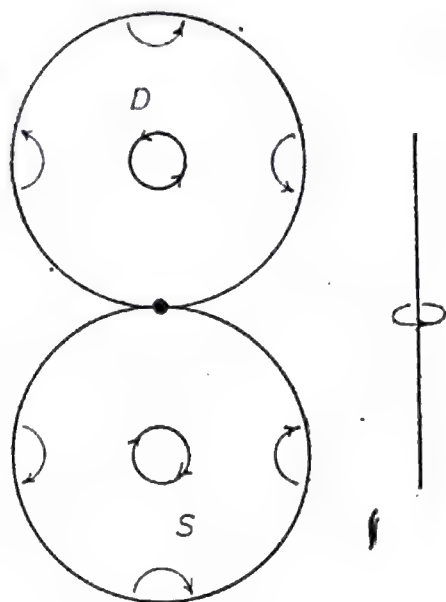


Fig. 44.3. Suprafața unui vector axial — exemplu de suprafață a unui pseudotensor de tip par. Simetria suprafeței este ∞/m . Săgețile circulare arată sensul de rotație. Cu literele D și S sînt notate părțile suprafeței care constau din puncte drepte sau respectiv, stîngi. În dreapta, vectorul axial cu lungimea și sensul corespunzător. De comparat cu suprafața unui vector polar, figura 22.3.

dacă rotației la dreapta i se atribuie semnul minus, iar celei la stînga semnul plus. Acest pseudotensor reprezintă activitatea optică a cristalelor din clasele $\bar{4}2m$, $\bar{4}$, $mm2$ și m , în particular, rotirea planului de polarizare a luminii în cristalele claselor $\bar{4}2m$

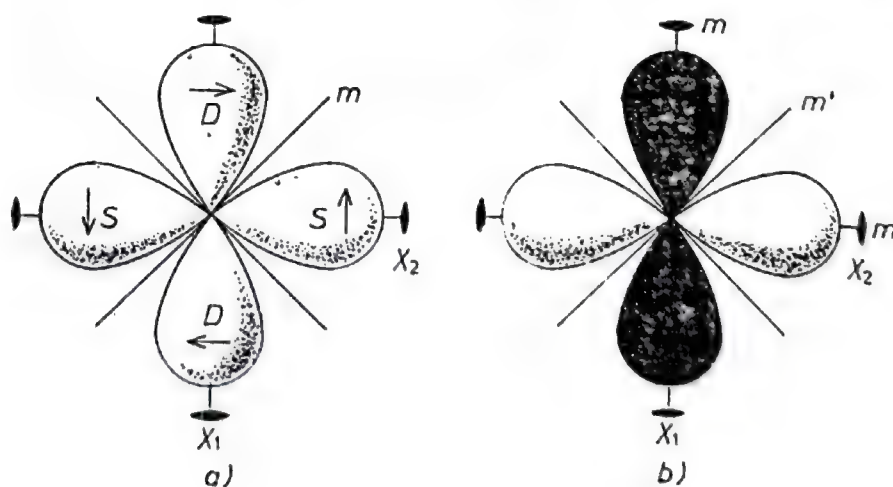


Fig. 44.4. Suprafețe : a) a unui pseudotensor simetric de rangul doi, de simetrie $\bar{4}2m$; b) a unui tensor simetric de rangul doi cu aceleași componente — simetria lui este mmm , antisimetria fiind $4'/mmm'$, v. § 68 (după Șubnikov, 1951).

și $\bar{4}$ atunci când indicii principali de refracție, N_o și N_e , coincid (v. § 81)*.

Dacă toate componentele cu același nume ale unui tensor propriu-zis și ale unui pseudotensor de același rang cu tensorul coincid, atunci suprafețele lor au aceeași figură. Deoarece însă razele vectoare care dau naștere acestor suprafețe au semnificații diferite precum și simetrii diferite, rezultă că atât sensul cât și simetria suprafețelor înseși vor fi, de asemenea, diferite. Aceasta se vede, de exemplu, în cazul comparării suprafețelor unui vector polar (v. fig. 22.3) cu cea a unui vector axial (fig. 44.3). Un alt exemplu: aceleași contururi ca și ale suprafeței pseudotensorului de rangul doi cu simetria $\bar{4}2m$, reprezentată în figura 44.4, a, le are și suprafața unui tensor propriu-zis de rangul doi, ale cărui componente sînt date de aceeași matrice, (44.10) (fig. 44.4, b). Însă atât simetria acestui tensor cât și suprafața lui sînt complet diferite: este grupul mmm , ca pentru orice tensor simetric de rangul doi cu trei valori proprii diferite ($-G$, G și 0) (grupul de antisimetrie al acestui tensor și al suprafeței lui fiind $4'/mmm'$ — v. §§ 67, 68).

Prin urmare, simetria suprafețelor este corect stabilită numai în cazul în care se ține seama de faptul că punctelor care o constituie li se atribuie o anumită culoare (semn), sau sens de rotație, adică de faptul că aceste suprafețe reprezintă, după expresia lui A. V. Șubnikov (1951), figuri materiale.

§ 45. METODA VERIFICĂRII DIRECTE

În acest paragraf va fi expus cel mai comod procedeu de deducere a condițiilor necesare pe care trebuie să le satisfacă un tensor invariant atât față de reflectarea într-un plan de simetrie cât și față de rotațiile în jurul axelor de ordinul doi și patru, precum și în jurul axelor de ordinul trei, care există în cristalele din sistemul cubic. Procedeu a fost propus de Fumi și se numește *metoda verificării directe* (Fumi, 1952).

În această metodă se folosesc în fond următoarele două circumstanțe: 1) componentele tensorilor se transformă ca și produsele componentelor vectorilor; 2) că de fapt ne interesează tipul tensorului de material în sistemul de coordonate cristalofizic, iar acesta este construit pe elementele de simetrie ale cristalului;

* Rotației la dreapta îi corespund, în definiția noastră, regiunile tot din dreapta ale suprafeței. Totodată, conform definiției folosite în optică, în cazul în care planul de polarizare este rotit spre dreapta, rotația se consideră levogiră (v. § 81), corespunzând valorilor negative ale componentei normale a pseudotensorului G_{ij} . Alegerea semnului matricii (44.10) este în concordanță tocmai cu acest fapt.

rezultă că atît axele de simetrie cît și normalele la planul de simetrie coincid cu axele de coordonate, cu bisectoarele unghiurilor dintre ele etc.

Să analizăm, de pildă, cum se vor transforma componentele unui vector la o rotație a sistemului de coordonate cu 90° în jurul axei X_3 . Dacă notăm versorii sistemului de coordonate „vechi” cu e_1, e_2, e_3 , iar pe cei ai sistemului „nou” cu e_1', e_2', e_3' , atunci se poate scrie

$$xe_1 + ye_2 + ze_3 = x'e_1' + y'e_2' + z'e_3',$$

x, y, z fiind cele trei componente ale vectorului.

Matricea cosinuşilor pentru rotația considerată este

$$\|c_{i'k}\| = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix},$$

„Noii” versori, dați de formula

$$e_{i'} = c_{i'k} e_k$$

vor fi

$$e_1' = e_2', \quad e_2' = -e_1', \quad e_3' = e_3.$$

Prin urmare,

$$xe_1 + ye_2 + ze_3 = x'e_2 - y'e_1 + z'e_3.$$

Întrucît versorii sînt liniar independenți, această ecuație este satisfăcută numai atunci cînd coeficienții versorilor corespunzători sînt egali cu

$$x' = y, \quad y' = -x, \quad z' = z.$$

(Același rezultat s-ar fi obținut imediat, dacă am fi aplicat matricea $\|c_{i'k}\|$ direct componentelor, nu versorilor; am ales o cale mai lungă, pentru ca în paragraful următor să aplicăm operații analoage coordonatelor ciclice, care, spre deosebire de coordonatele carteziane, nu se transformă în același fel cu vectorii ciclici ai bazei, care le corespund). Se vede că în acest caz componenta vectorului fie rămîne neschimbată, fie trece într-o altă componentă, schimbîndu-și eventual semnul. Aceasta se datorește formei matricei cosinuşilor: toate elementele ei sînt întregi, fiind egale cu $+1, -1$ sau 0 . Metoda verificării directe a lui Fumi este adec-

vată numai acelor operații de simetrie, care sînt definite prin matrice ale cosinuşilor, egale cu numere întregi.

Matricea cosinuşilor va fi egală cu un număr întreg numai în cazul rotațiilor speciale, anume rotațiile ale căror axe sînt dispuse într-un mod bine determinat față de sistemul de coordonate. În particular, pentru rotația cu 120° (axă de ordinul trei), matricea cosinuşilor va fi un număr întreg dacă axa de rotație face unghiuri egale cu axele X_1 , X_2 și X_3 , nemaifiind însă un număr întreg dacă această axă coincide cu vreuna dintre axele de coordonate. În tabelul 45.1 sînt cuprinse toate cazurile unor asemenea rotații, ce prezintă interes practic.

Tabelul 45.1

Transformările indicilor, folosite în metoda verificării directe

$\varepsilon =$	$\bar{1}$	2_z	2_x	2_y	2_{xy}	m_z	m_x	m_y	m_{xy}	4_z	$\bar{4}_z$	3_{xyz}
$x' =$	$-x$	$-x$	x	$-x$	y	x	$-x$	x	$-y$	y	$-y$	y
$y' =$	$-y$	$-y$	$-y$	y	x	y	y	$-y$	$-x$	$-x$	x	x
$z' =$	$-z$	z	$-z$	$-z$	$-z$	$-z$	z	z	z	z	$-z$	x

Observație. Indicii x, y, z arată că axa de simetrie (sau normala la planul de simetrie) coincide cu axele X_1, X_2 și X_3 . Indicele xy arată că axa este orientată după bisectoarea unghiului dintre axele X_1 și X_2 , iar indicele xyz că axa este orientată de-a lungul dreptei care face cu axele X_1, X_2 și X_3 unghiuri egale.

Vom examina acum cum se transformă, în cazul aceleiași rotații componentele tensorului de rangul doi. Pentru a ne folosi de faptul că ele se transformă la fel cu produsele dintre componentele vectorilor, vom nota componenta avînd indicele 11, cu simbolul $[xx]$, pe cea avînd indicii 12 cu $[xy]$ ș.a.m.d. Deoarece nu presupunem că tensorul este simetric în raport cu indicii săi (de exemplu, $[xy] \neq [yx]$), trebuie să fim foarte atenți cu ordinea „factorilor” din simbolurile componentelor, astfel încît nu cumva să îi permutăm arbitrar. În rest, aceste simboluri pot fi tratate ca produse obișnuite. Dacă componentele unui vector, în cazul operației 4_z suferă transformarea

$$x' = y, \quad y' = -x, \quad z' = z,$$

atunci atît componentele tensorului cît și produsele lor se vor transforma astfel

$$[xx]' = [yy], \quad [yx]' = -[xy], \quad [zx]' = [zy],$$

$$[xy]' = -[yx], \quad [yy]' = [xx], \quad [zy]' = -[zx],$$

$$[xz]' = [yz], \quad [yz]' = -[xz], \quad [zz]' = [zz].$$

Procedind la fel pentru operațiile 2_z , 2_x , și 3_{xyz} , întocmim următorul tabel

$g =$	2_z	2_x	4_z	3_{xyz}	$g =$	2_z	2_x	4_z	3_{xyz}
$[xx]' =$	$[xx]$	$[xx]$	$[yy]$	$[yy]$	$[zx]' =$	$-[zx]$	$-[zx]$	$[zy]$	$[xy]$
$[yy]' =$	$[yy]$	$[yy]$	$[xx]$	$[zz]$	$[xz]' =$	$-[xz]$	$-[xz]$	$[yz]$	$[yx]$
$[zz]' =$	$[zz]$	$[zz]$	$[zz]$	$[xx]$	$[xy]' =$	$[xy]$	$-[xy]$	$-[yx]$	$[yz]$
$[yz]' =$	$-[yz]$	$[yz]$	$-[xz]$	$[zx]$	$[yx]' =$	$[yx]$	$-[yx]$	$-[xy]$	$[zy]$
$[zy]' =$	$-[zy]$	$[zy]$	$-[zx]$	$[xz]$					

Dacă cristalul aparține clasei 2, axa 2 fiind paralelă cu X_3 , atunci componentele tensorului de material nu trebuie să se modifice în urma aplicării operației 2_z . Din această cauză sîntem îndreptățiți să punem semne de egalitate între indicii care se află pe aceeași linie, în coloanele întii și a doua ale tabelului. Însă o egalitate de forma $[yz] = [-yz]$ este satisfăcută numai pentru $[yz] = 0$. Egalitățile banale, de forma $[xx] = [xx]$ sînt valabile pentru orice valori ale componentelor respective. Rezultă deci că tensorul de material de rangul doi, pentru cristalele din clasa 2, va fi

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Tensorul examinat este de tip par și din această cauză, așa cum s-a arătat în paragraful precedent, el trebuie să aibă aceeași formă și pentru cristalele din celelalte clase care intră în același subsistem: m și $2/m$.

Să analizăm acum clasa 4. Dat fiind că printre operațiile grupului 4 există și operația 2_z , se pot egala cu zero dintr-odată componentele $[yz]$, $[zy]$, $[zx]$ și $[xz]$ (însă s-ar fi putut ca acestea să nu ne folosească; astfel, comparînd, de pildă, egalitățile $[yz] = [xz]$ și $[xz] = -[yz]$, apare evident că $[yz] = [xz] = 0$). Pentru celelalte componente avem

$$[xx] = [yy], [xy] = -[yx].$$

Prin urmare, pentru clasa 4 (precum și pentru clasele $\bar{4}$ și $4/m$) tensorul de material de rangul doi este

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ -T_{12} & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Până acum am examinat grupurile cu o singură generatoare. Pentru grupurile cu mai multe generatoare, condiția de egalitate a componentelor care se transformă și a celor care nu se transformă trebuie să fie satisfăcută pentru fiecare generatoare în parte. În tabelul 45.2 sînt date cele mai indicate seturi de generatoare pentru a fi folosite în metoda verificării directe.

Tabelul 45.2

Generatoarele (care generează elemente) grupurilor cristalografice și grupurilor limită

Grupul	Generatoarele	Grupul	Generatoarele
$\bar{1}$	$\bar{1}$	$4mm$	$4_z, m_x$
$2(2 \parallel X_2)$	2_y	$\bar{4}2m (2 \parallel X_1)$	$4_z, 2_x$
$2(2 \parallel X_3)$	2_z	$\bar{4}m2 (m \perp X_1)$	$4_z, m_x, \bar{1}$
$m(m \perp X_2)$	m_y	$4/mmm$	$4_z, 2_x, \bar{1}$
$m(m \perp X_3)$	m_z	$\bar{6}$	6_z
$2/m (2 \parallel X_2)$	$2_y, \bar{1}$	$\bar{6}$	$6_z, \bar{1}$
$2/m (2 \parallel X_3)$	$2_z, \bar{1}$	$6/m$	$6_z, 2_x$
222	$2_z, 2_x$	622	$6_z, m_x$
$mm2$	$2_z, m_x$	$6mm$	$6_z, m_x$
mmm	$2_z, 2_x, \bar{1}$	$\bar{6}m2(m \perp X_1)$	$6_z, m_x$
3	3_z	$\bar{6}2m (2 \parallel X_1)$	$6_z, 2_x$
$\bar{3}$	$3_z, \bar{1}$	$6/mmm$	$6_z, 2_x, \bar{1}$
$32(2 \parallel X_1)$	$3_z, 2_x$	23	$2_z, 3_{xyz}, \bar{1}$
$32(2 \parallel X_2)$	$3_z, 2_y$	$m3$	$2_z, 3_{xyz}, \bar{1}$
$3m (m \perp X_1)$	$3_z, m_x$	432	$4_z, 3_{xyz}$
$3m (m \perp X_2)$	$3_z, m_y$	$\bar{4}3m$	$4_z, 3_{xyz}, \bar{1}$
$\bar{3}m (2 \parallel X_1)$	$3_z, 2_x, \bar{1}$	$m3m$	$4_z, 3_{xyz}, \bar{1}$
$\bar{3}m (2 \parallel X_2)$	$3_z, 2_y, \bar{1}$	∞	∞_z
4	4_z	∞/m	$\infty_z, \bar{1}$
$\bar{4}$	$4_z, \bar{1}$	$\infty2$	$\infty_z, 2_x$
$4/m$	$4_z, \bar{1}$	∞m	∞_z, m_x
422	$4_z, 2_x$	∞/mm	$\infty_z, 2_x, \bar{1}$

Vom aplica această regulă pentru determinarea formei tensorului de material de rangul doi, pentru clasele 222, 422, 23 și 432 (și deci pentru toate clasele subsistemelor corespunzătoare).

Pentru clasa 222, în urma verificării invarianței față de 2_z , rămîn componentele $[xx]$, $[yy]$, $[zz]$, $[xy]$ și $[yx]$. Criteriul invarianței față de 2_x elimină ultimele două componente. Ca rezultat se obține

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Pentru clasa 422, după aplicarea criteriului invarianței față de 4_z , rămîn componentele $[xx] = [yy]$, $[zz]$, $[xy] = -[yx]$. Criteriul invarianței față de 2_x elimină ultima pereche de componente, astfel încît

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{vmatrix}.$$

Pentru clasa 23, studiind efectul operației 3_{xyz} asupra componentelor care rămîn în urma selecționării după 2_z , obținem egalitățile

$$[xx] = [zz] = [yy], [xy] = [zx] = 0, [yx] = [xz] = 0.$$

De aici,

$$\|T_{ij}\| = \begin{vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{vmatrix}.$$

Pentru clasa 432 obținem același rezultat, examinînd efectul aplicării operației 3_{xyz} asupra componentelor care rămîn după selecționarea pentru 4_z .

Exemplul analizat arată, mai întîi, că grupul cu simetrie exterioară a unui tensor se dovedește mai larg decît grupul de simetrie al cristalului, grup față de care trebuie să fie invariant tensorul dat (problema nu se reduce numai la adăugarea centrului de simetrie : impunînd tensorului condiția invarianței în raport cu grupul 23, am obținut un tensor a cărui simetrie este superioară nu numai lui $m\bar{3}$, ci mult mai înaltă, anume $\infty\infty m$).

În al doilea rînd, exemplul analizat pune în evidență legătura dintre simetria exterioară și simetria internă a unui tensor. Noi am analizat tensorul cu simetrie internă V^2 , adică ne-am preocupat dacă el este simetric (sau antisimetric) în raport cu indicii. Pentru clasele Laue $2/m$ și $4/m$ am și obținut un tensor cu simetrie internă, V^2 , pe cînd în cazul claselor Laue mmm , $4/mmm$, $m\bar{3}$ și $m\bar{3}m$ condițiile de invarianță au dus la creșterea simetriei interne a tensorului pînă la $[V^2]$, acesta devenind simetric în raport cu indicii săi. Astfel, simetria exterioară a unui tensor predetermină uneori simetria sa internă.

Aplicarea metodei verificării directe tensorilor de rang mai mare se face la fel de simplu. Singura dificultate este legată de faptul că ei au un număr mai mare de componente, astfel încît

problema devine cu mult mai laborioasă, chiar dacă nu și mai dificilă. Această dificultate poate fi într-o oarecare măsură evitată, dacă nu se scriu toate permutările indicilor : este clar, de exemplu, că avînd $[xz]' = [yz]$, atunci și $[zx]' = [zy]$.

Să luăm un tensor de rangul trei și să deducem ce formă va căpăta el pentru cristalele din clasele $\bar{4}2m$ și 422 . Pentru aceasta este suficient să se verifice efectul ce îl are asupra lui aplicarea generatoarelor $\bar{4}_z$ și 2_x pentru clasa $\bar{4}2m$ și 4_z și 2_x pentru clasa 422 (vezi tabelul 45.2). În acest scop vom întocmi tabelul :

$g =$	2_x	$\bar{4}_z$	4_z	$g =$	2_x	$\bar{4}_z$	4_z
$[xxx]' =$	$[xxx]$	$-[yyy]$	$[yyy]$	$[yyz]' =$	$-[yyz]$	$-[xxz]$	$[xxz]$
$[yyy]' =$	$-[yyy]$	$[xxx]$	$-[xxx]$	$[yyx]' =$	$[yyx]$	$-[xxy]$	$[xxy]$
$[zzz]' =$	$-[zzz]$	$-[zzz]$	$[zzz]$	$[zzx]' =$	$[zzx]$	$-[zzy]$	$[zzy]$
$[xxy]' =$	$-[xxy]$	$[yyx]$	$-[yyx]$	$[zzy]' =$	$-[zzy]$	$[zzx]$	$-[zzx]$
$[xxz]' =$	$-[xxz]$	$-[yyz]$	$[yyz]$	$[xyz]' =$	$[xyz]$	$[yxz]$	$-[yxz]$

Necesitatea invarianței față de 2_x impune anularea componentelor $[yyy]$, $[zzz]$, $[xxy]$, $[xxz]$, $[yyz]$, $[zzy]$, precum și a tuturor componentelor care se deosebesc de acestea numai prin permutarea indicilor. Componentele care rămîn le verificăm dacă sînt invariante față de $\bar{4}_z$ și obținem $[xxx] = [yyy] = 0$, $[yyx] = [xxy] = 0$, $[zzx] = [zzy] = 0$, $[xyz] = [yxz]$, ultima egalitate fiind valabilă pentru orice permutare a indicilor, făcută simultan, în partea sa din dreapta cît și din stînga. Prin urmare, în cazul unui tensor g , cu simetria internă V^3 , invariant față de grupul $\bar{4}2m$, se anulează numai următoarele componente

$$g_{123} = g_{213}, g_{231} = g_{132}, g_{312} = g_{321},$$

adică în total șase componente, trei dintre ele fiind independente. Pentru un tensor d , cu simetria internă $V[V^2]$, ale cărui componente satisfac condiția $d_{ikl} = d_{ilk}$, numărul componentelor independente se reduce la două

$$d_{123} = d_{213} = d_{231} = d_{132}, d_{312} = d_{321}.$$

În sfîrșit, tensorul f , cu simetria internă $[V^3]$ are numai o singură componentă independentă

$$f_{123} = f_{213} = f_{231} = f_{132} = f_{312} = f_{321}.$$

Pentru a găsi tensorii de rangul trei, invariante față de grupul 422 , verificăm componentele care mai rămîn neînălăturate

după operația 2_x în privința invarianței față de 4_z . Obținem egalitățile

$$\begin{aligned}[xxx] &= -[yyy] = 0, & [yyx] &= -[xxy] = 0, \\ [zzz] &= -[zzy] = 0, & [xyz] &= -[yxz].\end{aligned}$$

Judecînd ca și în cazul precedent, obținem faptul că tensorii g , invarianți față de grupul 422, cu simetria internă V^3 , au șase componente diferite de zero

$$g_{123} = -g_{213}, \quad g_{231} = -g_{132}, \quad g_{312} = -g_{321},$$

trei dintre ele fiind independente. Tensorii d , cu simetria internă $V[V^2]$ au numai patru componente

$$d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231},$$

dintre ele numai una fiind independentă. În sfîrșit, tensorii cu simetria internă $[V^3]$ vor fi, în acest caz, identic egali cu zero.

Astfel, aproape fără a face vreun calcul, se determină forma tensorilor de material de orice rang pentru cristalele din sistemele monoclinic, rombic, tetragonal și cubic. Cele 25 de tipuri de tensori și de pseudotensori de material, de la rangul zero pînă la rangul șase, inclusiv, sînt date în anexa E.

§ 46. COORDONATE CICLICE. TEOREMA LUI HERMANN

Metoda verificării directe, expusă în paragraful precedent, nu permite depistarea tensorilor invarianți față de grupul sistemelor trigonal și hexagonal, precum și față de grupurile limită de simetrie. Pentru realizarea acestor probleme sînt necesare metode mai complexe, dintre care una — metoda verificării directe în coordonate ciclice — va fi analizată aici.

Vom supune analizei vectorii ciclici ai bazei

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2), \quad \bar{\mathbf{j}} = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2), \quad \mathbf{e} = \mathbf{e}_3. \quad (46.1)$$

Doi dintre ei sînt complex-conjugați, ceea ce s-a notat prin supra-linierea vectorului $\bar{\mathbf{j}}$. Ei sînt însă liniar independenți, deoarece*

$$(\mathbf{j} \times \bar{\mathbf{j}}) \cdot \mathbf{e} = -\frac{1}{2}i \neq 0,$$

* Toate operațiile cu vectori complecși vor fi efectuate la fel cu operațiile cu vectori reali, considerîndu-l pe i drept un coeficient obișnuit (astfel încît $i^2 = -1$). Remarcăm că în algebra liniară produsul scalar al vectorilor complecși se definește în alt mod.

de aceea, ei pot fi folosiți drept bază. Inversarea formulelor (46.1) are forma

$$e_1 = j + \bar{j}, e_2 = -i(j - \bar{j}), e_3 = e. \quad (46.2)$$

Să scriem unul și același vector real în baza carteziană și în baza ciclică

$$xe_1 + ye_2 + ze_3 = \xi j + \bar{\xi} \bar{j} + ze.$$

Înlocuind pe e_1 și e_2 cu expresiile lor (46.2) și comparînd coeficienții vectorilor identici, găsim

$$\xi = x - iy, \bar{\xi} = x + iy, z = z. \quad (46.3)$$

Prin urmare, și aici supralinierea are sensul de complex conjugat.

Să rotim acum sistemul de coordonate în jurul axei X_3 cu unghiul φ . „Noii” vectori cartezieni ai bazei sînt egali cu

$$\begin{aligned} e_{1'} &= e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi, \\ e_{2'} &= -e_1 \sin \varphi + e_2 \cos \varphi, \\ e_{3'} &= e_3. \end{aligned} \quad (46.4)$$

Lor le corespunde și o „nouă” bază ciclică

$$j' = \frac{1}{2}(e_{1'} + ie_{2'}), \bar{j}' = \frac{1}{2}(e_{1'} - ie_{2'}), e' = e_{3'}. \quad (46.5)$$

Pentru a obține legea de transformare a vectorilor ciclici ai bazei în cazul unei astfel de rotații a sistemului de coordonate, vom exprima noii versori cartezieni prin versorii cartezieni vechi, iar pe aceștia din urmă cu ajutorul formulelor (46.2), prin vechii vectori ciclici ai bazei. Atunci vom obține

$$j' = e^{-i\varphi} j, \bar{j}' = e^{i\varphi} \bar{j}, e' = e. \quad (46.6)$$

De aici vom găsi legea de transformare a componentelor. Deoarece

$$\xi j + \bar{\xi} \bar{j} + ze = \xi' j' + \bar{\xi}' \bar{j}' + z' e',$$

rezultă că

$$\xi' = e^{i\varphi} \xi, \quad \bar{\xi}' = e^{-i\varphi} \bar{\xi}, \quad z' = z. \quad (46.7)$$

Dacă componentei ξ îi atribuim indicele 1, componentei $\bar{\xi}$, indicele -1 , iar componentei z , indicele 0, atunci legea de transformare a componentelor ciclice (însă nu a vectorilor bazei) la o rotație în jurul axei X_3 , se poate scrie cu ajutorul matricei $\|c_{k'l}\|$

$$c_{k'l} = e^{ik'\varphi} \delta_{k'l} = e^{il\varphi} \delta_{k'l}, \quad (46.8)$$

sub forma

$$A_{k'} = c_{k'l} A_l = e^{il\varphi} \delta_{k'l} A_l. \quad (46.9)$$

În mod corespunzător, legea de transformare a componentelor unui tensor A , de rang r , la rotația cu unghiul φ în jurul axei X_3 , capătă forma

$$A_{k'_1 \dots k'_r} = \exp [i(l_1 + \dots + l_r) \varphi] \delta_{k'_1 l_1} \dots \delta_{k'_r l_r} A_{l_1 \dots l_r}. \quad (46.10)$$

Dacă rotația în jurul axei X_3 reprezintă rotația unitară în jurul unei axe de simetrie de ordinul N , atunci $\varphi = 2\pi/N$, iar

$$c_{k'l} = \exp \left(\frac{2\pi i}{N} l \right) \delta_{k'l}. \quad (46.11)$$

Să presupunem acum că tensorul A , de rang r este dat prin componentele sale $A_{l_1 \dots l_r}$, din sistemul ciclic de coordonate. Să formulăm condițiile pe care trebuie să le satisfacă aceste componente, pentru ca tensorul A să fie invariant față de grupul N (adică față de rotațiile în jurul axei de simetrie de ordinul N). Avem matricea $\|c_{k'l}\|$ scrisă sub o formă foarte comodă pentru înlocuirea ei în ecuația fundamentală a invarianței, (44.3). Făcînd această operație, obținem

$$\left\{ \exp \left[\frac{2\pi i}{N} (l_1 + \dots + l_r) \right] - 1 \right\} A_{l_1 \dots l_r} = 0. \quad (46.12)$$

Numai acele componente pot fi diferite de zero pentru care se anulează acolada. Însă $e^{2\pi i s} = 1$ atunci, și numai atunci, cînd s este un număr întreg sau zero. Deci vor fi diferite de zero numai acele componente ciclice ale unui tensor invariant față de grupul

N a căror sumă a indicilor este egală cu zero sau divizibilă prin N . Am obținut o regulă foarte simplă, care ne permite scrierea directă a tuturor componentelor unui tensor care sînt diferite de zero, tensorul fiind invariant față de orice grup al rotațiilor, ce-i drept numai într-un sistem de coordonate ciclic. Să enumerăm, de pildă, componentele ciclice diferite de zero ale tensorului de rangul patru, A , invariant față de grupul 3 (pentru simplitate vom scrie semnul minus deasupra indicelui)

$$A_{\overline{1110}}, A_{\overline{1111}}, A_{\overline{1001}}, A_{0000}, A_{0111},$$

precum și componentele care se obțin din cele scrise, prin orice permutare posibilă a indicilor (numărul total al componentelor diferite de zero este egal cu $4 + 6 + 12 + 1 + 4 = 27$).

Să vedem cum se vor modifica aceste rezultate pentru rotațiile cu inversie. În cazul inversiei, coordonatele ciclice se comportă la fel ca și cele carteziane: toate își schimbă semnul. Din această cauză, matricea transformării coordonatelor ciclice, în cazul unei rotații cu inversie, se deosebește de matricea obținută mai înainte pentru rotația simplă, numai prin semn

$$c_{k'l} = -e^{i\varphi} \delta_{k'l}. \quad (46.13)$$

Condiția de invarianță a tensorului față de o axă de inversie de ordinul N va fi deci de forma

$$\left\{ (-1)^r \exp \left[\frac{2\pi i}{N} (l_1 + \dots + l_r) \right] - 1 \right\} A_{l_1 \dots l_r} = 0, \quad (46.14)$$

unde r este rangul tensorului A . Pentru tensorii de rang par, prin urmare, ea nu se deosebește, în general, de condiția de invarianță față de o axă simplă de același ordin. Însă în cazul tensorilor de rang impar, invarianți față de grupul \bar{N} vor fi diferite de zero numai componentele pentru care cîtul dintre suma indicilor și ordinul axei este un număr semiîntreg

$$\frac{1}{N} (l_1 + \dots + l_r) = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots \quad (46.15)$$

Într-adevăr, paranteza pătrată din ecuația de invarianță (46.14), pentru un r impar, se anulează în această situație, și numai în aceasta.

Generalizarea condițiilor de invarianță deduse pentru pseudo-tensori nu prezintă nici o dificultate.

Dacă un tensor are diferite de zero numai acele componente ciclice a căror sumă a indicilor este egală cu zero, atunci condiția de invarianță este satisfăcută pentru orice N . Aceasta înseamnă însă că tensorul dat este invariant față de grupul limită ∞ , fiind deci clar că numai acești tensori au o asemenea proprietate. Acest rezultat permite nu numai găsirea formei generale a tensorilor de material pentru texturi, ci stă, totodată, la baza demonstrării uneia dintre cele mai importante teoreme din fizica teoretică a cristalelor.

T e o r e m a l u i H e r m a n n . Dacă un tensor de rangul r are o axă de simetrie de ordinul N , iar $r < N$, atunci acest tensor are și o axă de simetrie de ordin infinit (Hermann, 1934).

Demonstrația acestei teoreme este foarte simplă. Deoarece indicii ciclici capătă numai valorile $-1, 0, 1$, suma indicilor pentru orice componentă nu depășește, în valoare absolută, rangul tensorului, r . Dacă $r < N$, atunci, pentru realizarea condiției de invarianță, este necesar ca această sumă, pentru componentele diferite de zero, să fie egală cu zero. Dar aceasta înseamnă că tensorul are o axă de simetrie de ordin infinit.

Teorema lui Hermann are numeroase aplicații. Tensorii de material de rangul doi pentru cristalele din categoria medie au, conform acestei teoreme, o axă de ordin infinit; studiind proprietățile dielectrice ale cristalelor, am întâlnit deja acest caz. Toți tensorii de rangul doi ai cristalelor cubice sînt izotropi, cristalele cubice avînd patru axe de ordinul trei; acest fapt l-am văzut, de asemenea. Mai departe, tensorii de rangul trei pentru cristalele claselor 4, 6 și pentru texturile din clasa ∞ coincid ca formă; de asemenea, acești tensori coincid pentru cristalele din clasele 422, 622 și texturile din clasa $\infty 2$, pentru cristalele clasei $4mm$, $6mm$ și pentru texturile clasei ∞m . Tensorii de rangul patru coincid ca formă pentru subsistemele $6/m$ și ∞/m precum și pentru subsistemele $6/mmm$ și ∞/mmm . Vom vedea mai tîrziu, cînd vom face cunoștință cu proprietățile care se exprimă cu ajutorul tensorilor de rangul trei și rangul patru, importanța acestor rezultate pentru fizica cristalelor.

Așadar, știm să găsim componentele ciclice nenule ale tensorilor invarianți față de grupurile N și \bar{N} , invarianți, totodată și față de grupul limită ∞ . Noi căutăm însă componentele carteziane ale tensorilor, nu pe cele ciclice. Se pune problema găsirii unui procedeu comod de transformare a componentelor ciclice în componente carteziane. Vedem că și aici ne este de folos faptul că componentele tensorilor se transformă ca produsele coordonatelor

corespunzătoare; tocmai pe aceasta este bazat procedeul pe care îl vom demonstra prin exemple.

Să convenim asupra unor notații. În locul indicilor ciclici 1, 0 și -1 vom scrie ξ , z și, respectiv, $\bar{\xi}$. Vom nota componentele tensoriale cu acolade cu un coeficient, de exemplu, $a\{\xi\xi\xi\}$; în acest caz, conținutul parantezelor pătrate arată ce indici are componenta dată, iar coeficientul, valoarea componentei.

Conținutul acoladelor poate fi supus transformărilor identice conform formulei (46.3), și anume

$$\{\xi\} = \{x - iy\} = \{x\} - i\{y\},$$

$$\{\bar{\xi}\} = \{x + iy\} = \{y\} + i\{x\}.$$

Dacă în acolade intră doi sau mai mulți indici, trebuie efectuată înmulțirea; aceasta se face în mod obișnuit, dar cu o singură deosebire: în nici un caz nu se admite schimbarea ordinii factorilor, deoarece aceasta ar însemna permutarea indicilor. Coeficientul poate fi însă permutat în orice loc, ba chiar se poate scoate afara parantezei. De exemplu,

$$\{\xi\xi\} = \{(x - iy)(x - iy)\} = \{xx\} - \{yy\} - i\{xy\} - i\{yx\}.$$

Parantezele $\{\bar{\xi}\bar{\xi}\}$ se obțin direct din parantezele precedente luând conjugatele complexe, adică schimbând semnul termenilor imaginari; aceasta reduce la jumătate numărul de operații. Mai remarcăm că, având calculate, să zicem, parantezele

$$\begin{aligned} \{\xi\xi\bar{\xi}\} &= \{xxx\} + \{xyy\} + \{yxy\} - \{yyx\} + \\ &+ i(\{xxy\} - \{xyx\} - \{yxx\} - \{yyy\}), \end{aligned}$$

se pot transcrie imediat și parantezele $\{\xi\bar{\xi}\xi\}$ și $\{\bar{\xi}\xi\xi\}$ — pentru aceasta fiind necesar să se facă pur și simplu permutările coresponzătoare și în partea dreaptă a egalității: pentru obținerea lui $\{\xi\bar{\xi}\xi\}$ trebuie schimbate între ele locurile indicilor al doilea și al treilea, în toate parantezele din membrul drept, iar pentru deducerea lui $\{\bar{\xi}\xi\xi\}$ locurile primului cu cel de al treilea indice.

Vom lua acum un exemplu: să calculăm un tensor de rangul trei, invariant față de rotațiile în jurul axei de ordinul trei. Îl scriem sub forma

$$\begin{aligned} g &= a\{\xi\xi\xi\} + \bar{a}\{\bar{\xi}\bar{\xi}\bar{\xi}\} + b_1\{\xi\xi z\} + \bar{b}_1\{\bar{\xi}\bar{\xi} z\} + b_2\{\xi z \bar{\xi}\} + \\ &+ \bar{b}_2\{\bar{\xi} z \xi\} + b_3\{z \xi \bar{\xi}\} + \bar{b}_3\{z \bar{\xi} \xi\} + d\{zzz\}. \end{aligned}$$

Aici sînt transcrise toate componentele lui care nu se anulează, $a, \bar{a}, b_1, \bar{b}_1, \dots$, fiind coeficienți complecși arbitrari. Desfăcînd parantezele obținem

$$\begin{aligned} g = & (a + \bar{a}) (\{xxx\} - \{xyy\} - \{yxy\} - \{yyx\}) + \\ & + i(a - \bar{a}) (\{yyy\} - \{xxy\} - \{xyx\} - \{yxx\}) + \\ & + (b_1 + \bar{b}_1) (\{xxz\} + \{yyz\}) + i(b_1 - \bar{b}_1) (\{xyz\} - \{yxz\}) + \\ & + (b_2 + \bar{b}_2) (\{xxz\} + \{yzy\}) + i(b_2 - \bar{b}_2) (\{xzy\} - \{yzx\}) + \\ & + (b_3 + \bar{b}_3) (\{zxx\} + \{zyy\}) + i(b_3 - \bar{b}_3) (\{zxy\} - \{zyx\}) + d\{zzz\}. \end{aligned}$$

Evident, coeficienții acoladelor, care conțin indicii x, y, z , sînt componentele corespunzătoare din sistemul de coordonate cartezian. Se constată că acestea sînt legate între ele. Într-adevăr, egalitatea obținută arată că vor fi diferite de zero numai componentele

$$[rxx] = -[xyy] = -[yxy] = -[yyx] \text{ sau } g_{111} = -g_{122} = -g_{212} = -g_{221}$$

$$[yyy] = -[xxy] = -[xyx] = -[yxx] \text{ sau } g_{222} = -g_{112} = -g_{121} = -g_{211},$$

$$[xxz] = [yyz] \text{ sau } g_{113} = g_{223},$$

$$[xyz] = -[yxz] \text{ sau } g_{123} = -g_{213},$$

$$[xxz] = [yzy] \text{ sau } g_{131} = g_{232},$$

$$[xzy] = -[yzx] \text{ sau } g_{132} = -g_{231},$$

$$[zxx] = [zyy] \text{ sau } g_{311} = g_{322},$$

$$[zxy] = -[zyx] \text{ sau } g_{312} = -g_{321},$$

$$[zzz] \text{ sau } g_{333}.$$

Prin urmare, dintre cele 21 de componente diferite de zero, numai nouă sînt independente.

Să studiem tensorul d , de asemenea invariant față de grupul 3, care însă, în afară de aceasta, este și simetric în raport cu indicii

al doilea și al treilea. Componentele sale diferite de zero sînt următoarele

$$d_{111} = -d_{122} = -d_{212} = -d_{221}, \quad d_{222} = -d_{112} = -d_{121} = -d_{211},$$

$$d_{113} = d_{131} = d_{223} = d_{232}, \quad d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231},$$

$$d_{311} = d_{322}, \quad d_{333}.$$

În total sînt 19 componente, dintre care 6 sînt independente.

În fine, tensorul f , simetric în raport cu toți indicii, invariant în raport cu același grup, are diferite de zero componentele

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221}, \quad f_{222} = -f_{112} = -f_{121} = -f_{211},$$

$$f_{113} = f_{131} = f_{311} = f_{223} = f_{322} = f_{232}, \quad f_{333}.$$

Sînt 15 la număr, independente fiind doar patru.

Nici construirea tensorilor corespunzători, invarianti față de grupul 32 sau grupul $3m$ nu întîmpină vreo dificultate. Pentru aceasta este necesar să se determine componentele care se anulează ca urmare a condiției de invarianță față de 2_x sau, respectiv, m_x . Astfel, pentru grupul 32, utilizînd tabelul întocmit în paragraful precedent special pentru un tensor de rangul trei, vom găsi componentele tensorului g , diferite de zero

$$g_{111} = -g_{122} = -g_{212} = -g_{221},$$

$$g_{123} = -g_{213}, \quad g_{132} = -g_{231}, \quad g_{312} = -g_{321},$$

ale tensorului d

$$d_{111} = -d_{122} = -d_{212} = -d_{221}, \quad d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231}$$

și, în sfîrșit, ale tensorului f

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221}.$$

Un alt procedeu de construire a tensorilor invarianti față de grupurile sistemelor trigonal și hexagonal este dat în lucrările lui Fumi (1952, a) sau Fieschi și Fumi (1953).

§ 47. APLICAREA TEORIEI REPREZENTĂRIILOR GRUPURILOR LA PROBLEMELE DE SIMETRIE A TENSORILOR

Numeroase probleme legate de simetria tensorilor se rezolvă cu ajutorul metodelor matematice speciale, bazate pe rezultate mai profunde din teoria grupurilor (mai exact, ale unuia dintre capitolele acesteia denumit teoria reprezentărilor grupurilor). Aceste metode se aplică pe larg în ultimul timp, în toate ramurile fizicii teoretice în care este necesar să se țină cont de simetria obiectelor analizate: în teoria spectrelor moleculare și în teoria spectrelor cristalelor, în teoria particulelor elementare, în teoria reacțiilor nucleare etc.

Vom prezenta aici, fără a face demonstrația, numai două dintre rezultate, care interesează simetria tensorilor. Primul dintre ele este procedeul de construire a unui tensor invariant față de un grup cristalografic dat, G , folosind procedeul medierii tensorului în raport cu grupul: tensorului general A , de simetrie internă dată, trebuie să i se aplice toate operațiile de simetrie, g , care intră în grupul G , calculându-se apoi media aritmetică a tuturor rezultatelor obținute

$$\langle A \rangle_G = \frac{1}{N(G)} \sum_{g \in G} g A. \quad (47.1)$$

Dacă grupul G are două generatoare, este mai indicat să se medieze mai întâi tensorul în raport cu subgrupul său, H_1 , determinat de una dintre generatoare, iar după aceasta, rezultatul primei medieri să fie mediat în raport cu subgrupul H_2 , determinat de cealaltă generatoare. Ordinea medierilor succesive nu contează. De exemplu, un tensor, invariant față de grupul 422 (generatoarele lui sînt 4_z și 2_x) poate fi calculat atît în ordinea

$$\langle A \rangle_4 = \frac{1}{4} (A + 4_z A + 2_z A + 4_z^3 A),$$

$$\langle A \rangle_{422} = \frac{1}{2} (\langle A \rangle_4 + 2_z \langle A \rangle_4),$$

cît și în ordinea

$$\langle A \rangle_2 = \frac{1}{2} (A + 2_x A),$$

$$\langle A \rangle_{422} = \frac{1}{4} (\langle A \rangle_2 + 4_z \langle A \rangle_2 + 2_z \langle A \rangle_2 + 4_z^3 \langle A \rangle_2).$$

Un al doilea rezultat important, obținut cu ajutorul metodelor teoriei reprezentărilor grupurilor constă în posibilitatea calculării numărului componentelor independente ale unui tensor având date atât simetria internă cât și cea exterioară, fără a mai fi necesar să se calculeze pentru aceasta tensorul însuși (Bhagavantam și Suryanarayana, 1949 ; Jahn, 1949 ; v., de asemenea, Bhagavantam și Venkatarayudu, 1959 ; Liubarski, 1957). Acesta este egal cu media luată în raport cu grupul cristalografic G , a valorii caracterului reprezentării tensoriale, T , corespunzătoare

$$\langle \chi_T \rangle_G = \frac{1}{N(G)} = \sum_{g \in G} \chi_T(g) \quad (47.2)$$

(această metodă se aplică și grupurilor limită — atunci medierea se realizează cu ajutorul integrării în raport cu grupul).

În tabelul 47.1 este dat numărul componentelor independente ale tensorilor și ale pseudotensorilor de diferite simetrii exterioare și interne, pînă la rangul opt inclusiv. Tabelul 47.1, a cuprinde tensorii și pseudotensorii de tip par, iar tabelul 47.1, b tensorii și pseudotensorii de tip impar. În primul dintre ele, toate cele 39 de grupuri cristalografice și grupuri limită sînt reunite în subsisteme, deoarece forma generală a unui tensor de tip par, invariant față de un grup cristalografic sau limită, este aceeași pentru toate grupurile care intră într-un subsistem. Sînt 14 astfel de subsisteme (11 cristalografice și 3 limită). În al doilea tabel sînt date numai grupurile fără centru de simetrie, deoarece mărimile tensoriale de tip impar, invariante față de grupurile cu centru de simetrie, sînt identic egale cu zero. Sînt în total 25 de grupuri fără centru de simetrie (21 cristalografice și 4 limită).

În tabele este menționat nu numai numărul de componente independente, ci și numărul de invarianți independenți, atunci cînd acesta din urmă se deosebește de numărul de componente independente. În aceste cazuri, unui subsistem din tabelul 47.1, a sau unui grup din tabelul 47.1, b îi corespund două rînduri de numere : cel de sus cuprinde șirul numerelor de componente independente, iar cel de jos șirul numerelor de invarianți independenți.

Diferența dintre numărul de componente independente și numărul de invarianți independenți este egală cu numărul de parametri necesari pentru a defini orientarea tensorului respectiv față de sistemul de coordonate. Astfel, în cazul unui vector, singurul invariant al acestuia este lungimea sa. În cristalele care au axă de simetrie vectorul de material trebuie să coincidă ca direcția cu axa. Această condiție definește complet orientarea vectorului față de sistemul de coordonate. Din această cauză, numărul componentelor independente ale vectorului este egal, pentru aceste

Tabelul 47.1, a

Numărul de componente independente și de invarianți independenți
al tensorilor de tip par

	$D_0 \sim \{V^2\}$	$\epsilon V \sim \{D_1\} \sim \{V^2\}$	D_1	$[V^2]$	V^2	ϵD_3	$\epsilon [V^2]$	$\epsilon V [V^2] \sim [V^2] \{V^2\}$	ϵV^3	D_4	$[V^4]$	$\epsilon [V^4]$	$\epsilon [V^2] [V^2]$
$\infty\infty m, \infty\infty$	1	0	0	1	1	0	0	0	1	0	1	1	2
$m3m, 432, \bar{4}3m$	1	0	0	1	1	0	0	0	1	1	2	2	3
$m3, 23$	1	0	0	1	1	1	1	1	2	1	2	3	3
$\infty/mm, \infty m, \infty 2$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5
$\infty/m, \infty$	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5
$6/mmm, 622, 6mm, \bar{6}m2$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5
$6/m, 6, \bar{6}$	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5
$4/mmm, 422, 4mm, \bar{4}2m$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	2	4	5	6
$4/m, 4, \bar{4}$	1	1	1	2	3	1	2	4	7	3	5	8	7
										2	4	7	6
$\bar{3}m, 32, 3m$	1	0	1	2	2	1	1	2	4	2	4	6	6
						3	3	6	9	3	5	10	7
$\bar{3}, 3$	1	1	1	2	3								
						2	3	5	8	2	4	9	6
$mmm, 222, mm2$	1	0	2	3	3	1	1	3	6	3	6	9	9
			3	4	5	3	4	8	13	5	9	16	13
$2/m, 2, m$	1	1											
			2	3	4	2	3	7	12	4	8	15	12
		3	5	6	9	7	10	18	27	9	15	30	21
$\bar{1}, 1$	1												
		1	2	3	6	4	7	15	24	6	12	27	18

Tabelul 47.1, a (continuare)

	$\epsilon^2 A^2$	$[\epsilon^2 A^2]$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 D_5$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$	$\epsilon^2 A^2$
$\infty\infty m, \infty\infty$	2	3	2	3	0	0	0	0	0	1	1	3
$m3m, 432, \bar{4}3m$	3	4	3	4	0	0	1	1	1	3	3	6
$m3, 23$	4	5	5	7	0	1	3	4	4	7	8	13
$\infty/m, \infty m, \infty 2$	6	8	7	10	0	0	2	3	3	7	8	15
$\infty m/, \infty$	8	11	12	19	1	3	7	10	11	16	20	32
$6/mmm, 622, 6mm, \bar{6}m2$	6	8	7	10	0	0	2	3	3	7	8	15
$6/m, 6, \bar{6}$	8	11	12	19	1	3	7	10	11	16	20	32
$4/mmm, 422, 4mm, \bar{4}2m$	7	9	8	11	1	1	4	5	5	10	11	19
$4m, 4, \bar{4}$	10	13	14	21	3	5	11	14	15	22	26	40
	9	12	13	20	2	4	10	13	14	21	25	39
$\bar{3}m, 32, 3m$	8	10	10	14	1	2	6	8	8	14	16	26
$\bar{3}, 3$	12	15	18	27	3	7	15	20	21	30	36	54
	11	14	17	26	2	6	14	19	20	29	35	53
$mmm, 222, mm2$	12	15	15	21	2	3	9	12	12	21	24	39
	20	25	28	41	5	9	21	28	29	44	52	80
$2/m, 2, m$	19	24	27	40	4	8	20	27	28	43	51	79
	36	45	54	81	11	21	45	60	63	90	108	162
$\bar{1}, 1$	33	42	51	78	8	18	42	57	60	87	105	159

Tabelul 47.1, a (continuare)

	D_6	$[V^6]$	$[V^4]$	$[V^3]$	$[V^2]$	$[V]$	εD_7	$\varepsilon [V^7]$	$\varepsilon [V^6]$	D_8	$[V^8]$	$[V^4]$	$[V^2]$	$[V]$
$\infty\infty m, \infty\infty$	0	1	1	3	2	4	5	0	0	0	0	1	1	2
$m3m, 432, \bar{4}3m$	1	3	4	6	6	9	12	0	0	2	1	4	6	10
$m3, 23$	2	4	6	8	9	13	20	1	2	6	1	5	10	16
$\infty/mm, \infty m, \infty 2$	1	4	6	9	10	16	23	0	0	3	1	5	8	14
$\infty/m, \infty$	1	4	9	10	14	22	38	1	4	10	1	5	12	20
$6/mmm, 622, 6mm, \bar{6}m2$	2	5	7	10	11	17	24	1	1	5	2	7	12	19
	3	6	11	12	16	24	40	3	6	14	3	9	20	30
$6/m, 6, \bar{6}$	2	5	10	11	15	23	39	2	5	13	2	8	19	29
$4/mmm, 422, 4mm, \bar{4}2m$	2	6	10	12	15	22	32	1	2	8	3	9	16	26
	3	8	17	16	24	34	56	3	8	20	5	13	28	44
$4/m, 4, \bar{4}$	2	7	16	15	23	33	55	2	7	19	4	12	27	43
$\bar{3}m, 32, 3m$	3	7	12	14	18	26	40	2	4	12	3	10	20	32
	5	10	21	20	30	42	72	5	12	28	5	15	36	56
$\bar{3}, 3$	4	9	20	19	29	41	71	4	11	27	4	14	35	55
$mmm, 222, mm2$	4	10	18	20	27	39	60	3	6	18	5	15	30	48
	7	16	33	32	48	68	112	7	16	40	9	25	56	88
$2/m, 2, m$	6	15	32	31	47	67	111	6	15	39	8	24	55	87
	13	28	63	56	90	126	216	15	36	84	17	45	108	168
$\bar{1}, 1$	10	25	60	53	87	123	213	12	33	81	14	42	105	165

Numărul de componente independente și de invarianți independenți al tensorilor de tip impar

	$\varepsilon = \varepsilon D_0 = \{V_3\}$	$D_1 = V = \varepsilon\{V_2\}$	εD_2	$\varepsilon\{V_2\}$	$\varepsilon V_2 = V\{V_3\}$	D_3	$[V_2]$	$V[V_2]$	V_3	εD_4	$\varepsilon[V_1]$	$\varepsilon V[V_2] = \{V_3\}$	$\varepsilon[V_2]_2$	$\varepsilon[V_2]_3$	D_5	$[V_3]$	$\{V_3\}V$	$V[V_2]_3$	$[V_3]V$	$[V_3]V$	$V[V_2]_3$	$[V_3]V$	$V[V_2]_3$	$[V_3]V$	$V[V_2]_3$	D_7	$[V_1]$	$[V_0]$
$\infty\infty$	1	0	0	1	1	0	0	0	1	0	1	1	2	2	0	0	0	0	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0
432	1	0	0	1	1	1	0	0	1	1	2	2	3	3	0	0	1	1	3	3	6	0	0	0	2	0	0	2
$\overline{43m}$	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	2	3	4	5	7	1	2	4	4	1	2	4
23	1	0	0	1	1	1	1	1	2	1	2	3	3	4	0	1	3	4	7	8	13	1	2	6	6	1	2	6
$\infty 2$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5	6	0	0	2	3	7	8	15	0	0	3	3	0	0	3
∞m	0	1	0	0	1	1	2	3	4	0	0	2	0	2	1	3	5	8	9	12	17	1	4	7	7	1	4	7
∞	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5	8	1	3	7	11	16	20	32	1	4	10	1	4	10	
622	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5	6	0	0	2	3	7	8	15	1	1	5	1	1	5	
6mm	0	1	0	0	1	1	2	3	4	0	0	2	0	2	1	3	5	8	9	12	17	2	5	9	2	5	9	
$\overline{6}m2$	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	2	1	2	1	2	4	5	7	8	11	1	3	7	1	3	7	
6	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5	8	1	3	7	11	16	20	32	3	6	14	3	6	14	
$\overline{6}$	0	0	0	0	0	2	2	2	2	2	2	4	2	4	2	4	8	10	14	16	22	2	6	14	2	6	14	

422	1	0	1	2	2	0	0	1	3	2	4	5	6	7	1	1	4	5	5	10	11	19	1	2	8	
4mm	0	1	0	0	1	1	2	3	4	1	1	3	1	3	2	4	7	10	9	12	15	21	2	6	12	
42m	0	0	1	1	1	1	1	2	3	1	2	4	3	5	1	2	5	7	7	11	13	20	2	4	10	
4	1	1	1	2	3	1	2	4	7																	
4			2	2	2	2	2	4	6	2	4	8	6	10	2	4	10	14	14	22	26	40	4	8	20	
4	0	0	1	1	1	1	1	3	5	1	3	7	5	9	1	3	9	13	13	21	25	39	3	7	19	
32	1	0	1	2	2	1	1	2	4	2	4	6	6	8	1	2	6	8	8	14	16	26	2	4	12	
3m	0	1	0	0	1	2	3	4	5	1	1	4	1	4	2	5	9	13	12	16	20	28	3	8	16	
3	1	1	1	2	3																					
222	1	0	2	3	3	1	1	3	6	3	6	9	9	12	2	3	9	12	12	21	24	39	3	6	18	
mm2	0	1	1	1	2	2	3	5	7	2	3	7	4	8	3	6	12	17	16	23	28	41	4	10	22	
2			3	4	5	3	4	8	13	5	9	16	13	20	5	9	21	29	28	44	52	80	7	16	40	
m			2	3	4	2	3	7	12	4	8	15	12	19	4	8	20	28	27	43	51	79	6	15	39	
			2	2	2	4	4	6	10	14	4	6	14	8	16	6	12	24	34	32	46	56	8	20	44	
	0		1	1	1	3	3	5	9	13	3	5	13	7	15	5	11	23	33	31	45	55	81	7	19	43
			3	5	6	9	7	10	18	27	9	15	30	21	36	11	21	45	63	60	90	108	162	15	36	84
1	1		1	2	3	6	4	7	15	24	6	12	27	18	33	8	18	42	60	57	87	105	159	12	33	81

clase, cu numărul invariantilor săi independenți, adică cu unitatea. În cristalele din clasa m , vectorul de material se află în planul de simetrie fiind necesar un parametru care să definească direcția vectorului; de aceea, numărul de componente independente crește la două. În sfârșit, în clasa 1, direcția unui vector nu este limitată în nici un fel, deci pentru definirea sa sînt necesari doi parametri; numărul de componente independente crește, în mod corespunzător, la trei.

Un alt exemplu este tensorul simetric de rangul doi, $[V^2]$. Invariantii săi independenți pot fi considerați valorile proprii, de pildă — ele definesc complet forma și dimensiunile suprafeței unui tensor. În cristalele din categoria superioară suprafața este o sferă; ea se caracterizează printr-un singur invariant; evident, nu este necesar să i se definească orientarea. În cristalele din categoria medie suprafața reprezintă o suprafață de rotație și este dată prin doi invarianti. Pentru orientarea ei ar fi suficient să se indice direcția axei de rotație, deoarece ea coincide cu axa principală de simetrie a cristalului; rezultă că și în acest caz numărul de componente independente este egal cu numărul de invarianti independenți, adică cu doi. În cristalele din categoria inferioară suprafața se definește prin trei invarianti independenți. Pentru a-i defini direcția, este suficient să se determine poziția axelor sale de simetrie. În cristalele din sistemul rombic acestea coincid cu axele de simetrie ale cristalului, astfel încît, pentru orientarea suprafeței nu mai sînt necesari alți parametri suplimentari. În cristalele din sistemul monoclinic pentru acestea este necesar un singur parametru suplimentar, care definește rotația suprafeței în jurul axei de ordinul doi sau a normalei la planul de simetrie al cristalului, astfel încît numărul de componente independente crește pînă la patru. În cristalele din sistemul triclinic, pentru orientarea suprafeței față de sistemul de coordonate, sînt necesari trei parametri suplimentari, numărul de componente independente fiind egal cu șase.

Din tabelele 47.1, a și 47.1, b se pot trage anumite concluzii relativ la forma tensorilor invarianti, față de grupurile date, cît și referitor la simetria tensorilor sau a funcțiilor tensoriale.

Dacă numărul de componente independente, în cazul a doi tensori cu simetrie internă diferită, invarianti față de același grup cristalografic sau grup limită, este aceeași, iar unul dintre grupurile de simetrie internă este un subgrup al celuilalt, atunci forma generală a acestor tensori va fi aceeași. Astfel, de exemplu, tensorii V^2 și $[V^2]$ sînt invarianti față de grupul mmm . Dacă un tensor de rangul doi este invariant față de acest grup, el va fi în mod obligatoriu simetric în raport cu indicii. Tabelul E.6 tocmai confirmă această concluzie.

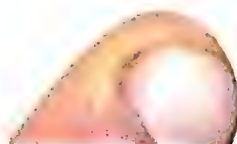
Dacă numărul de componente independente ale unor tensori cu simetrie internă dată și invarianți față de două grupuri, este același, unul dintre cele două grupuri fiind un subgrup al celuilalt, atunci forma generală a acestor tensori va fi aceeași. În acest caz simetria tensorilor și simetria funcțiilor-tensori sînt evident aceleași.

Dacă numărul invarianților independenți pentru tensorii de material ai două grupuri este același, unul dintre grupuri fiind un subgrup al celuilalt, atunci grupurile de simetrie exterioară ale acestor tensori coincid. Dacă în același timp numărul de componente independente este diferit, atunci grupurile de simetrie exterioară ale funcțiilor-tensori sînt tot diferite. Numărul de invarianți independenți este legat, astfel, de simetria tensorului, iar numărul de componente independente de simetria funcțiilor-tensori. Deci, coincidența dintre numărul de invarianți independenți ai tensorului $[V^2]$, pentru sistemele rombic, monoclinic și triclinic, arată că simetria exterioară a tensorului $[V^2]$ este aceeași pentru aceste sisteme, fiind egală cu mmm . Pe de altă parte, simetria exterioară a funcției-tensor $[V^2]$ este, pentru aceste trei sisteme, din contra diferită, fiind egală respectiv cu mmm , $2/m$ și 1 . Coincidența numărului de invarianți independenți ai tensorului $[[V^2]^2]$ pentru subsistemele superior și inferior ai sistemului tetragonal arată că simetria exterioară a acestui tensor este egală cu $4/mmm$, pentru ambele subsisteme. Simetria funcției-tensor $[[V^2]^2]$ este diferită pentru subsistemele inferior și superior, întrucît numărul lor de componente independente este același.

Se pot prezenta și alte exemple în care calculul numărului de componente independente și al numărului de invarianți independenți arată că grupurile de simetrie exterioară ale tensorului și ale funcției-tensor corespunzătoare nu coincid. Unele cazuri de ne-coincidență a grupurilor de simetrie ale tensorului și ale funcției-tensor sînt date în tabelul 47.2.

Cu simbolurile D_r , în tabelele 47.1,a și 47.1,b sînt notați *tensorii ireductibili* de rang r — aceștia sînt tensori simetrici în raport cu toți indicii, toate urmele lor fiind egale cu zero. Astfel, D_2 este simbolul tensorului simetric de rangul doi, T , a cărei urmă, $T_{ii} = 0$; D_3 este simbolul tensorului de rangul trei, simetric în raport cu toți indicii, care satisface condiția $T_{iij} = T_{jij} = T_{jji} = 0$. Tensorii ireductibili se numesc astfel, pentru că se transformă după reprezentările ireductibile ale grupului rotațiilor (după aceleași reprezentări se transformă și funcțiile sferice; asupra legăturii dintre ele și tensorii ireductibili, vezi Șcerbakov, 1972). Tensorii ireductibili ai primelor patru ranguri au denumiri speciale: *vector*, *deviator*, *septor*, *nonor* (Shouten, 1965).

În tabelul 47.3 sînt grupați toți tensorii ireductibili enumerați, de tip impar, care se deosebesc prin simetria exterioară.



Cazurile în care simetria funcției-tensor este mai mică decât simetria tensorului

S	G	m	G^{ω}	n	S	G	m	G^{ω}	n
V	∞m	1	1	3	V^3	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
			m	2					
ϵV	∞/m	1	$\bar{1}$	3	$[V^4]$	$\bar{3}m$	4	$\bar{3}$	5
$[V^2]$	mmm	3	$\bar{1}$	6		$4/mmm$	4	$4/m$	5
			$2/m$	4	$\epsilon [V^4]$	32	4	3	5
$\epsilon [V^2]$	222	3	1	6		422	4	4	5
			2	4	$[[V^2]^2]$	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
	$\bar{4}2m$	1	n	2		$\bar{3}m$	6	$\bar{3}$	7
			$\bar{4}$	2	$\epsilon [[V^2]^2]$	$4/mmm$	6	$4/m$	7
$[V^3]$	$mm2$	3	2	4		32	6	3	7
	$3m$	3	3	4	$[V^5]$	422	6	4	7
	$\bar{4}3m$	1	$\bar{4}$	2		$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2	$[V^6]$	$4mm$	4	4	5
						$6/mmm$	5	$6/m$	6
$V [V^2]$	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2	$[V^7]$	$6mm$	5	6	6

Notății. G și G^{ω} — grupuri de simetrie exterioară ale funcției-tensor, S — grupul de simetrie internă a lor, m și n — numărul de invarianți independenți și, respectiv, de componente independente.

Tabelul 47.3

Tensorii ireductibili de diverse simetrii

Deviatori și pseudodeviatori

D

\hat{D}

	1	2	3	
<i>mmm</i>	$-a$	0	0	1 222
		$-b$	0	2
			$a+b$	3 2 $\parallel X_1, X_2, X_3$
<i>mmm</i>	$-a$	0	0	$\bar{4}2m$
		a	0	
			0	$\bar{4} \parallel X_3, 2 \parallel X_1$
<i>∞/mmm</i>	$-a$	0	0	$\infty 2$
		$-a$	0	
			$2a$	$\infty \parallel X_3$

Septori și pseudoseptori

S
 \hat{S}

	11	22	33	23	
1	$a+b \quad -a \quad -b \quad g$				
1 2	$-c \quad c+d \quad -d$				$\bar{1}$
3	$-e \quad -f \quad e+f$				

m	$a+b \quad -a \quad -b \quad 0$				$\bar{1}$
	$0 \quad 0 \quad 0$				
m \parallel X_2	$-e \quad -f \quad e+f$				2'/m

mm2	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$				2/m
	$0 \quad 0 \quad 0$				
2 \parallel X_2, m \perp X_1	$-e \quad -f \quad e+f$				2/mm' m'

$3m$	$\begin{array}{c cccc} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline & -c & c & 0 & \\ \hline & -e & -e & 2e & \end{array}$	$\bar{3}$ $\bar{3}m'$	
$3 \parallel X_3, m \perp X_1$	$\begin{array}{c cccc} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline & -c & c & 0 & \\ \hline & 0 & 0 & 0 & \end{array}$	$\bar{3}m$ $\bar{6}/mmm$	
$\bar{6}m2$	$\begin{array}{c cccc} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline & -c & c & 0 & \\ \hline & 0 & 0 & 0 & \end{array}$	$\bar{6} \parallel X_3, m \perp X_1$	
∞m	$\begin{array}{c cccc} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline & 0 & 0 & 0 & \\ \hline & -e & -e & 2e & \end{array}$	∞/m ∞/mm'	
$\infty \parallel X_3$	$\begin{array}{c cccc} & 0 & 0 & 0 & g \\ \hline & 0 & 0 & 0 & \\ \hline & 0 & 0 & 0 & \end{array}$	$m3$ $m3m'$	

Nonori și pseudononori

\mathbf{N}						$\tilde{\mathbf{N}}$	
	11	22	33	23	13	12	
$\bar{1}$	$\begin{array}{ cccccc } \hline b+c & -c & -b & d+e & -g & -h \\ \hline c+a & -a & -d & f+g & -k & \\ \hline a+b & -e & -f & h+k & & \\ \hline \end{array}$						$\begin{array}{l} 11 \\ 22 \bar{1} \\ 33 \end{array}$
$2/m$	$\begin{array}{ cccccc } \hline b+c & -c & -b & 0 & -g & 0 \\ \hline c+a & -a & 0 & f+g & 0 & \\ \hline a+b & 0 & -f & 0 & & \\ \hline \end{array}$						$\begin{array}{l} 2 \\ 2 \parallel X_2 \end{array}$
$\bar{1}$	$\begin{array}{ cccccc } \hline 0 & 0 & 0 & d+e & 0 & -h \\ \hline 0 & 0 & -d & 0 & -k & \\ \hline 0 & -e & 0 & h+k & & \\ \hline \end{array}$						$\begin{array}{l} m \\ 2'/m' \\ m \perp X_2 \end{array}$

$\begin{array}{c} mmm \\ \left[\begin{array}{cccccc} b+c & -c & -b & 0 & 0 & 0 \\ c+a & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a+b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 222 \\ 2 \parallel X_1, X_2, X_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} 4/mmm \\ \left[\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 4mm \\ 4 \parallel X_3, m \perp X_1 \end{array}$
$\begin{array}{c} 2/m \\ \left[\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h+k & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 2 \\ 2 \parallel X_3, m \perp X_1 \end{array}$	$\begin{array}{c} mmm \\ \left[\begin{array}{cccccc} -a & 0 & a & 0 & 0 & 0 \\ a & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 42m \\ 4 \parallel X_3, 2 \parallel X_1 \end{array}$
$\begin{array}{c} 2/mmm' \\ \left[\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h+k & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 2 \\ 2 \parallel X_3, m \perp X_1 \end{array}$	$\begin{array}{c} 3m \\ \left[\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 6m2 \\ 6 \parallel X_3, m \parallel X_1 \end{array}$
$\begin{array}{c} 3m \\ \left[\begin{array}{cccccc} -3c & -c & 4c & d & 0 & 0 \\ -3c & 4c & -d & 0 & 0 & 0 \\ -8c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 32 \\ 3 \parallel X_3, 2 \parallel X_1 \end{array}$	$\begin{array}{c} \infty/mmm' \\ \left[\begin{array}{cccccc} -3c & -c & 4c & 0 & 0 & 0 \\ -3c & 4c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -8c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} \infty 2 \\ \infty \parallel X_3 \end{array}$
$\begin{array}{c} 4/mmm \\ \left[\begin{array}{cccccc} a+c & -c & -a & 0 & 0 & 0 \\ a+c & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 422 \\ 4 \parallel X_3, 2 \parallel X_1 \end{array}$	$\begin{array}{c} m3m \\ \left[\begin{array}{cccccc} 2a & -a & -a & 0 & 0 & 0 \\ 2a & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$	$\begin{array}{c} 432 \\ 4 \parallel X_1, X_2, X_3 \end{array}$

Tensorii de tip par ai fiecărui subsistem au aceeași formă ca și tensorii de tip impar pentru clasa enantiomorfă a aceluiași subsistem, ceea ce și este utilizat în tabel. Tensorilor de tip impar pentru clasele neenantiomorfe le corespund tensori de tip par, care se deosebesc de alți tensori ai aceluiași subsistem prin grupul de antisimetrie — și acesta din urmă este dat în tabelul 47.3 (asupra antisimetriei tensorilor, vezi §§ 67, 68). În tabelele 47.3 și 47.4 vectorii sînt notați cu V , deviatorii cu D , septorii cu S și nonorii cu N ; tilda deasupra literei înseamnă „pseudo”.

Mulți dintre tensorii enumerați în tabelul 47.3 au numai un singur invariant independent; astfel sînt, de pildă, deviatorii de simetrie ∞/mmm , pseudodeviatorii $\infty 2$ și $42m$, septorii $43m$, ∞m , $6m2$. Suprafața fiecăruia dintre acești tensori are o formă perfect

determinată, putind fi diferită numai dimensiunea ei, în funcție de mărimea invariantului. Dacă o astfel de suprafață nu iese din

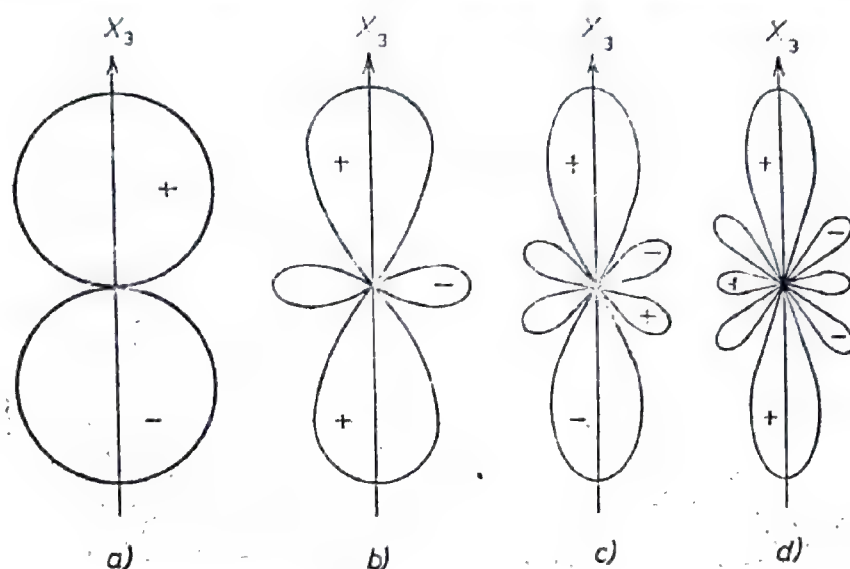


Fig. 47.1. Secțiuni ale suprafețelor tensorilor unitari : a) a unui vector, $V^0[\infty m]$ și a unui pseudovector $\tilde{V}^0[\infty /m]$; a unui deviator, $D^0[\infty /mm]$, și a unui pseudodeviator, $\tilde{D}^0[\infty 2]$; c) a unui septor, $S^0[\infty m]$, și a unui pseudoseptor, $\tilde{S}^0[\infty /m]$; d) a unui nonor, $N^0[\infty /mm]$, și a unui pseudononor, $\tilde{N}^0[\infty 2]$; pentru pseudotensori, părțile pozitive și cele negative sînt înlocuite prin părți dextrogire și părți levogire (Butabaev și Sirotin, 1972).

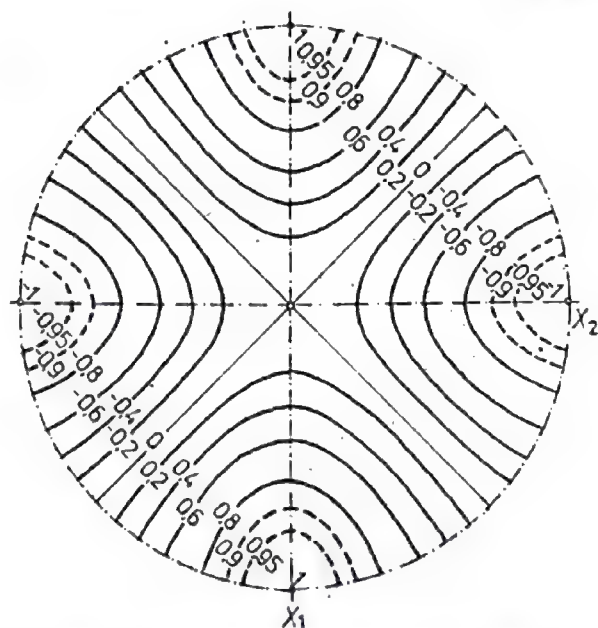


Fig. 47.2. Proiecția stereografică a suprafeței unui pseudodeviator $\tilde{D}^0[\bar{4}2m]$; cifrele pozitive corespund regiunilor dextrogire, iar cele negative, regiunilor levogire. Aceeași formă are proiecția stereografică a suprafeței unui deviator unitar de simetrie mmm și antisimetrie $4'/m'nm'$ (v. § 68),

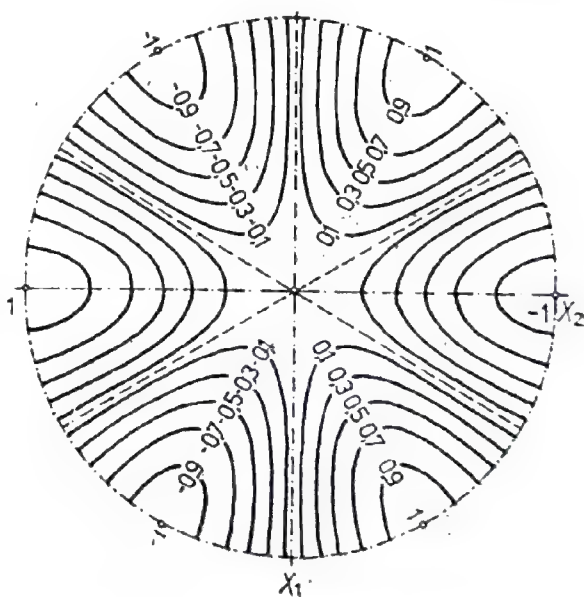


Fig. 47.3. Proiecția stereografică a suprafeței unui septor unitar, $S^0[\bar{6}m2]$, și a unui pseudoseptor, $\tilde{S}^0[3m]$.

limitele sferei de rază unitate, fiind tangentă în regiunea sa pozitivă (respectiv dreaptă) la aceasta, vom numi suprafața precum și tensorul pe care îl reprezintă, *unitari*. În figura 47.1 sint date secțiunile suprafețelor tensorilor și pseudotensorilor unitari care au axa ∞ , iar în figurile 47.2 — 47.6 proiecțiile stereografice ale

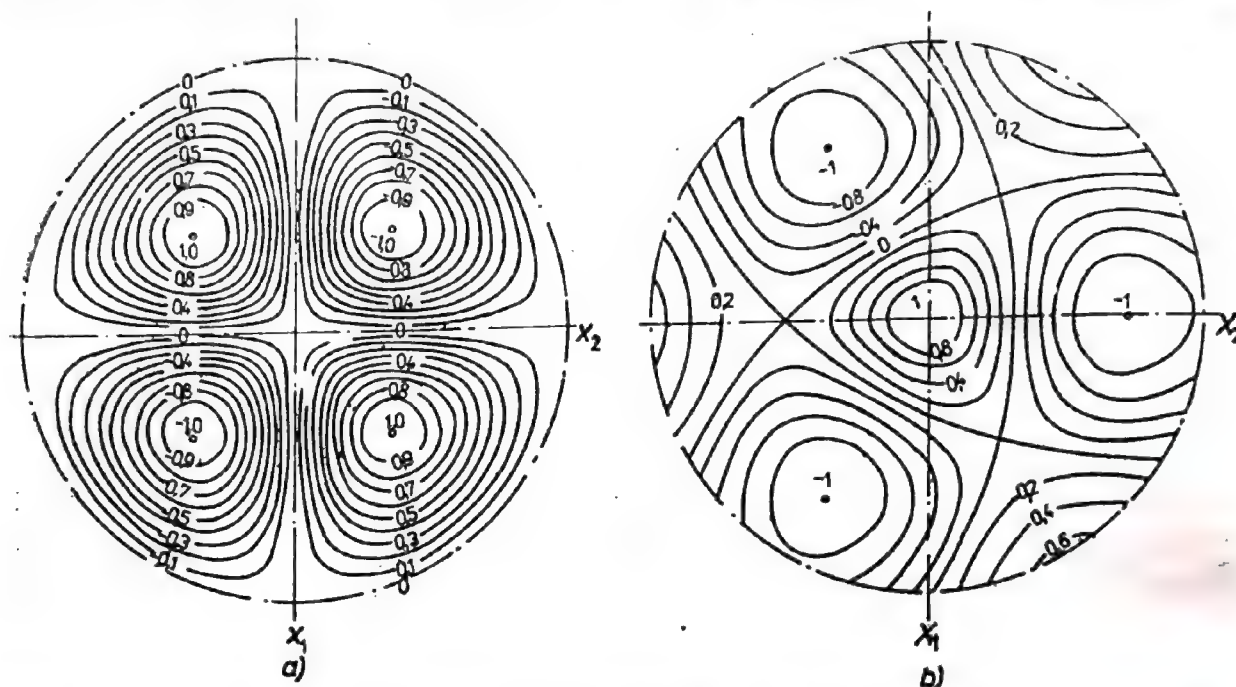


Fig. 47.4. Proiecțiile stereografice ale suprafeței unui septor unitar, $S^0[43m]$, și a unui pseudoseptor, $\tilde{S}^0[m3]$; a) în structură standard („cubică”) $4 \parallel X_1X_2, X_3$; b) în structură „romboedrică” $3 \parallel X_3, m \perp X_1$.

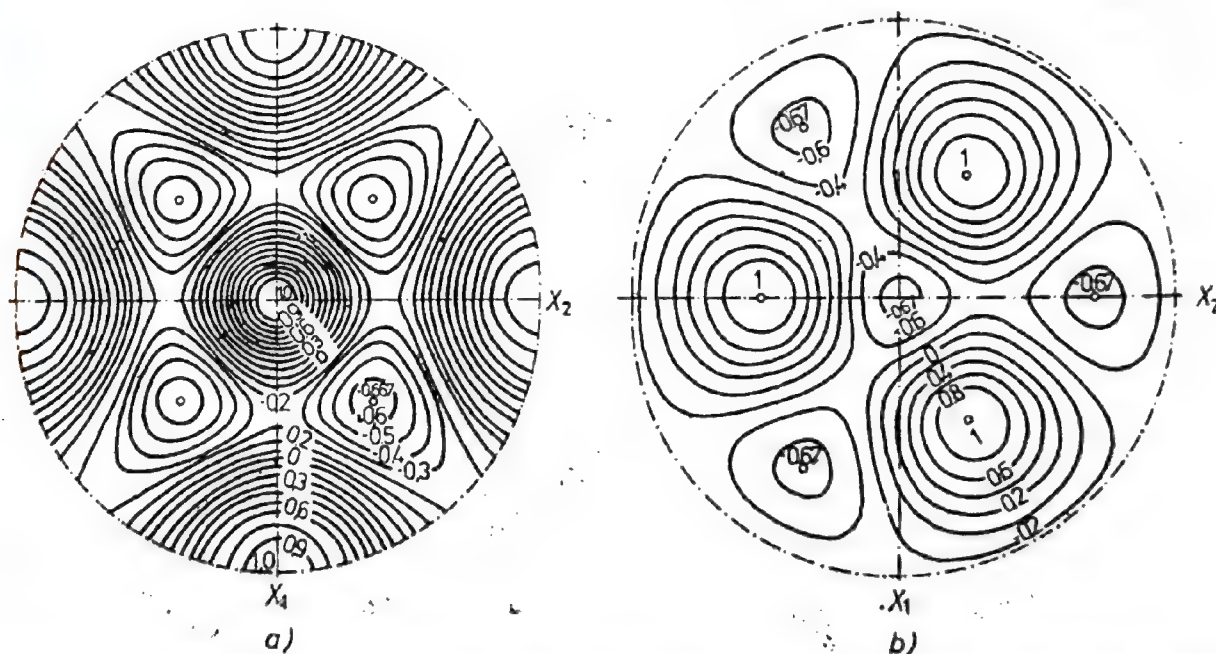
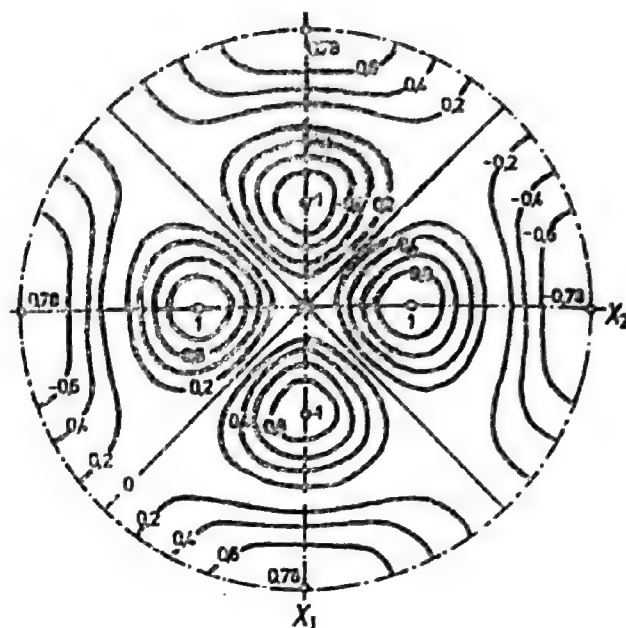


Fig. 47.5. Proiecțiile stereografice ale suprafeței unui nonon unitar, $N^0[m3m]$, și a unui pseudononon, $\tilde{N}^0[432]$; a) în structură standard („cubică”) $4 \parallel X_1X_2, X_3$; b) în structură „romboedrică”, $3 \parallel X_3, 2 \parallel X_1$.

Tensorii unitari, ireductibili și suprafețele lor

Tensorii și orientările lor	Componentele nenule	Ecuatia suprafeței
$V^0[\infty m], \tilde{V}^0[\infty/m], \infty \parallel X_3$	$V_3^0 = 1$	$r = \cos \vartheta$
$D^0[\infty/mm], \tilde{D}^0[\infty 2], \infty \parallel X_3$	$D_{11}^0 = D_{22}^0 - 1/2, D_{33}^0 = 1$	$r = (1/4) (1 + 3 \cos 2\vartheta)$
$\tilde{D}^0[\bar{4}2m], \bar{4} \parallel X_3, 2 \parallel X_1$	$D_{11}^0 = 1, D_{22}^0 = -1$	$r = (1/2) (1 - \cos 2\vartheta) \cos 2\varphi$
$S^0[\infty m], \tilde{S}^0[\infty/m], \infty \parallel X_3$	$S_{33}^0 = 1, S_{113}^0 = S_{223}^0 = -1/2$	$r = (1/8) (3 \cos \vartheta + 5 \cos 3\vartheta)$
$S^0[\bar{4}3m], \tilde{S}^0[m3], 2 \parallel X_1, X_2, X_3$	$S_{123}^0 = \sqrt{3/2}$	$r = (3 \sqrt{3}/8) (\cos \vartheta - \cos 3\vartheta) \sin 2\varphi$
$S^0[\bar{4}3m], \tilde{S}^0[m3], 3 \parallel X_3, 2 \parallel X_1$	$S_{33}^0 = 1, S_{113}^0 = S_{223}^0 = -1/2,$ $S_{112}^0 = 1/\sqrt{2}, S_{222}^0 = -1/\sqrt{2}$	$r = (1/8) [3 \cos \vartheta + 5 \cos 3\vartheta +$ $+ \sqrt{2} (3 \sin \vartheta - \sin 3\vartheta) \sin 3\varphi]$
$S^0[\bar{6}m2], \tilde{S}^0[\bar{3}m], 3 \parallel X_3, m \perp X_1$	$S_{112}^0 = 1, S_{222}^0 = -1$	$r = (1/4) (3 \sin \vartheta - \sin 3\vartheta) \sin 3\varphi$
$N^0[\infty/mm], \tilde{N}^0[\infty 2], \infty \parallel X_3$	$N_{111}^0 = N_{222}^0 = 3/8, N_{333}^0 = 1,$ $N_{112}^0 = 1/8, N_{113}^0 = N_{223}^0 = -1/2,$ $N_{111}^0 = N_{222}^0 = N_{333}^0 = 1,$	$r = (1/64) (9 + 20 \cos 2\vartheta + 35 \cos 4\vartheta +$ $+ 5 (3 - 4 \cos 2\vartheta + \cos 4\vartheta) \cos 4\varphi]$
$N^0[m2\bar{n}], \tilde{N}^0[432], 4 \parallel X_1, X_2, X_3$	$N_{223}^0 = N_{331}^0 = N_{112}^0 = -1/2$	$r = - (1/96) [9 + 20 \cos 2\vartheta + 35 \cos 4\vartheta -$ $- 20 \sqrt{2} (2 \sin 2\vartheta - \sin 4\vartheta) \sin 3\varphi]$
$N^0[m3m], \tilde{N}^0[432], 3 \parallel X_3, 2 \parallel X_1$	$N_{111}^0 = N_{222}^0 = -1/4, N_{333}^0 = -2/3,$ $N_{112}^0 = -1/12, N_{113}^0 = N_{223}^0 = 1/3,$ $N_{113}^0 = 5\sqrt{2}/6, N_{223}^0 = -5\sqrt{2}/6$	$r = (7/72) (3 + 4 \cos 2\vartheta -$ $- 7 \cos 4\vartheta) \cos 2\varphi$
$\tilde{N}^0[\bar{4}2m], \bar{4} \parallel X_3, 2 \parallel X_1$	$N_{111}^0 = N_{223}^0 = 7/9$ $N_{222}^0 = N_{113}^0 = -7/9$	

Fig. 47.6. Proiecția stereografică a suprafeței unui pseudononon unitar, $N^0[42m]$; cifrele pozitive corespund părților dextrogire, iar cele negative, părților levogire.



suprafețelor altor câtorva tensori și pseudotensori unitari. Componentele diferite de zero ale acestor tensori și ecuațiile suprafețelor lor sînt cuprinse în tabelul 47.4. Menționăm că ecuațiile suprafețelor tensorilor ireductibili unitari, D_l , care au axă ∞ , se exprimă prin polinoamele Legendre, P_l , de ordinul l (v. Ianke, Emde, Lösch, 1968): $r = P_l(\cos \theta)$. Pe suprafețe apar clar simetria și antisimetria tensorilor ireductibili unitari, extremurile componentelor lor normale precum și planurile izotrope. În proiecțiile stereografice ele apar ca linii de nivel, care coincid cu cercurile mari (în particular, cu cercul proiecției, cînd axa de izotropie iese din centrul proiecției, sau cu diametrul cînd axa de izotropie iese pe cercul proiecției). Astfel, figura 47.5 demonstrează că pentru $N^0[m3m]$ sînt izotrope planurile $\{111\}$ (în figura 47.5, b una dintre ele este dusă pe cercul proiecției); pe aceste planuri, $r = -0,25$.

Pentru alte aplicații ale teoriei reprezentărilor grupurilor în fizica cristalelor, în special în teoria tranzițiilor de fază și în teoria vibrațiilor cristalului (și a spectrelor de absorbție și de difuzie combinată, determinate de ele) vezi Liubarski (1957); Bhagavantam și Vencatarayudu (1959); Wigner (1961); Heine (1963); Landau și Lifșit (1963, capitolele XII, XIII și 1964, capitolele XII, XIV); Hamermesch (1966); Kaplan (1969); Sușcinski (1969); Noks și Gold (1970); Streitwolf (1971); Bhagavantam (1966).

§ 48. TENSORI IZOTROPI ȘI TENSORI GIROTROPI

Se numesc *tensori izotropi* tensorii invariianți față de grupul $\infty\infty m$, iar *tensori girotropi*, cei invariianți față de grupul $\infty\infty$. Este limpede că astfel de tensori pot descrie proprietățile mediilor izotrope și girotrope. Metoda verificării directe a lui Fumi este, în general, inaplicabilă unor astfel de tensori, iar aplicarea meto-

dei medierii în raport cu grupul este și ea relativ dificilă, dat fiind că este legată de integrarea pe întreg grupul. Pe de altă parte, tensorii izotropi și girotropi și pseudotensorii se deduc ușor cu ajutorul teoriei invarianților algebrici.

Evident orice tensor de forma

$$\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} \dots \delta_{i_{r-1} i_r} \quad (48.1)$$

este izotrop, ca toți izomerii săi. Este izotropă, prin urmare, și orice combinație liniară a unor astfel de izomeri. Este adevărată și teorema reciprocă: orice tensor izotrop de rangul r poate fi reprezentat ca o combinație liniară a tuturor izomerilor posibili ai tensorului (48.1) (Gurevici, 1948). Această teoremă rezolvă complet problema construirii formei generale a tensorilor izotropi.

Toți tensorii izotropi de rangul doi au forma

$$T_{ij} = a\delta_{ij}. \quad (48.2)$$

Deoarece tensorul Kronecker, δ_{ij} , este simetric în raport cu indicii, simetria exterioară $\infty\infty m$ a unui tensor de rangul doi determină deja simetria internă, $[V^2]$, a acestui tensor*.

Un tensor izotrop de rangul patru este o combinație liniară de izomeri ai tensorului $\delta_{ij}\delta_{kl}$

$$T_{ijkl} = a\delta_{ij}\delta_{kl} + b\delta_{ik}\delta_{jl} + c\delta_{il}\delta_{jk}. \quad (48.3)$$

Toate componentele diferite de zero ale acestui tensor,

$$\begin{aligned} T_{1111} &= T_{2222} = T_{3333} = a + b + c, \\ T_{2233} &= T_{3311} = T_{1122} = T_{3322} = T_{1133} = T_{2211} = a, \\ T_{2323} &= T_{3131} = T_{1212} = T_{3232} = T_{1313} = T_{2121} = b, \\ T_{2332} &= T_{3113} = T_{1221} = T_{3223} = T_{1331} = T_{2112} = c, \end{aligned} \quad (48.4)$$

* Acest fapt se utilizează în termodinamică. În § 57 se demonstrează în mod special caracterul simetric al tensorului permittivității dielectrice, κ , în procesele izotermice și în cele adiabactice; în cazul altor procese el este, în general, nesimetric. Dacă însă simetria lui internă, $[V^2]$, rezultă direct din simetria exterioară (acest fapt se produce nu numai pentru corpurile izotrope, ci și pentru sistemele cubice și rombic precum și pentru subsistemele superioare ale sistemelor trigonal, tetragonal și rombic și pentru texturi), atunci urmează că pentru mediile cu simetria corespunzătoare, demonstrația termodinamică a caracterului simetric al tensorului permittivității dielectrice este evidentă, în plus, deosebit de important fiind faptul că acest tensor este simetric, nu numai în cazul proceselor izotermice și celor adiabactice, ci în general pentru orice procese.

sînt legate între ele prin relația

$$T_{1111} = T_{2233} = T_{2323} = T_{2332}. \quad (48.5)$$

Simetria internă a acestui tensor se exprimă prin egalitățile

$$T_{ijkl} = T_{klij} = T_{jikl} = T_{ilkj}. \quad (48.6)$$

În cristalografia teoretică se utilizează tensori de rangul patru cu simetria internă $[[V^2]^2]$, $[V^2]^2$, $[V^4]$ și $V[V^3]$. Să stabilim forma generală a tensorilor izotropi corespunzători.

Un tensor izotrop de rangul patru, invariant față de permutarea primilor doi indici și a ultimilor doi precum și față de permutarea dintre prima și a doua pereche de indici, trebuie să satisfacă, în afară de relația (48.6), și egalitatea $T_{ijkl} = T_{jikl}$, pentru aceasta fiind necesar ca $b = c$. Din această cauză, forma generală a unui tensor izotrop, de simetrie internă $[[V^2]^2]$ este următoarea

$$T_{ijkl} = a\delta_{ij}\delta_{kl} + b(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \quad (48.7)$$

Simetria internă a lui $[V^2]^2$ este mai mică decît a lui $[[V^2]^2]$, adică orice tensor, invariant față de grupul simetriei interne, $[[V^2]^2]$, este invariant și față de grupul $[V^2]^2$. Totuși, din tabelele 47.1,a și 47.1,b rezultă că numărul de componente independente, în cazul tensorilor izotropi de simetrie internă $[[V^2]^2]$ și $[V^2]^2$, este același (fiind egal cu doi). Din compararea acestor două fapte rezultă că și forma generală a acestor tensori este aceeași. Prin urmare, forma generală a tensorilor izotropi de simetrie internă $[V^2]^2$ este definită tot prin formula (48.7).

Din aceleași cauze, formula (48.7) este valabilă și pentru tensorii izotropi de simetrie internă $V^2[V^2]$.

Complet analog se obține și forma generală a tensorilor izotropi de simetrie internă $[V^4]$ și $V[V^3]$

$$T_{ijkl} = a(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \quad (48.8)$$

Un tensor izotrop obișnuit, de rangul șase, apare ca o combinație liniară a 15 izomeri. Să calculăm, de exemplu, forma unui tensor izotrop de simetrie internă $[[V^2]^3]$:

$$\begin{aligned} L_{ijklmn} = & a\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{mn} + b(\delta_{ij}\delta_{km}\delta_{ln} + \delta_{ij}\delta_{kn}\delta_{lm} + \delta_{im}\delta_{kl}\delta_{jn} + \\ & + \delta_{in}\delta_{kl}\delta_{jm} + \delta_{ik}\delta_{jl}\delta_{mn} + \delta_{il}\delta_{jk}\delta_{mn}) + c(\delta_{ik}\delta_{jm}\delta_{ln} + \delta_{ik}\delta_{jn}\delta_{lm} + \\ & + \delta_{il}\delta_{jm}\delta_{kn} + \delta_{il}\delta_{jn}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{jk}\delta_{ln} + \delta_{im}\delta_{jl}\delta_{kn} + \\ & + \delta_{in}\delta_{jk}\delta_{lm} + \delta_{in}\delta_{jl}\delta_{km}); \end{aligned} \quad (48.9)$$

coeficienții a , b , c se exprimă prin componentele lui

$$\begin{aligned} a &= L_{112233}, \quad b = \frac{1}{2} (L_{112222} - L_{112233}), \\ c &= \frac{1}{8} (L_{111111} + 2L_{112233} - 3L_{112222}). \end{aligned} \quad (48.10)$$

Tensorii izotropi de rang mai mare — opt, zece etc. — pot fi construiți cu ajutorul aceleiași metode, însă, spre deosebire de cazurile studiate, numărul de izomeri liniar independenți, L_r , ai tensorului (48.1), pentru $r \geq 8$, va fi mai mic decât numărul lor total, $N_r = r!/2^n n!$ (rangul tensorului este $r = 2n$). Aceasta face ca coeficienții izomerilor să nu poată fi determinați univoc, punându-se astfel problema suplimentară a dezvoltării unui tensor izotrop după combinații liniar independente ale izomerilor tensorului (48.1). O problemă analoagă apare și pentru pseudotensorii izotropi, metoda de rezolvare a ei fiind analizată mai jos, luând ca exemplu cel mai simplu caz.

Pseudotensorii izotropi au, spre deosebire de tensorii izotropi, rang impar. Orice pseudotensor izotrop de rang r poate fi reprezentat sub formă de combinație liniară a izomerilor pseudotensorului

$$\delta_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5} \dots \delta_{i_{r-1} i_r}, \quad (48.11)$$

$\delta_{i_1 i_2 i_3}$ fiind pseudotensorul Levi-Civita. Numărul acestor izomeri va fi $N_r = r!/3! 2^n n!$, unde rangul este $r = 2n + 3$. În tabelul ce urmează, pentru fiecare rang r este dat numărul N_r de tensori izotropi de forma (48.1), sau de pseudotensori izotropi de forma (48.11) precum și numărul L_r de izomeri liniar independenți (pentru calculul lui L_r se utilizează metodele teoriei reprezentărilor grupurilor; vezi, de exemplu, Liubarski, 1957):

$r =$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10,
$N_r =$	0	1	1	3	10	15	105	105	1260	945,
$L_r =$	0	1	1	3	6	15	36	91	232	603.

Acest tabel arată că încă de la rangul cinci un pseudotensor izotrop este nerațional să fie reprezentat sub forma

$$\begin{aligned} P_{ijklm} &= A\delta_{ijk}\delta_{lm} + B\delta_{ijl}\delta_{km} + C\delta_{ijm}\delta_{kl} + D\delta_{ikl}\delta_{jm} + \\ &+ E\delta_{ikm}\delta_{jl} + F\delta_{ilm}\delta_{jk} + G\delta_{jkl}\delta_{im} + H\delta_{jkm}\delta_{il} + K\delta_{jlm}\delta_{ik} + L\delta_{klm}\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (48.12)$$

pentru că cei zece izomeri scriși, fiind legați între ei prin patru relații liniare, coeficienții A, \dots, L nu pot fi univoc determinați. Să dezvoltăm acest pseudotensor după termeni simetrici și termeni antisimetrici

$$P_{ijklm} = P_{(ij)k(lm)} + P_{[ij]k(lm)} + P_{(ij)k[lm]} + P_{[ij]k[lm]}. \quad (48.13)$$

Primul termen este dat direct de (48.12)

$$P_{(ij)k(lm)} = a(\delta_{ikl} \delta_{jlm} + \delta_{ikm} \delta_{jil} + \delta_{jkl} \delta_{ilm} + \delta_{jkm} \delta_{il}). \quad (48.14)$$

Pentru dezvoltarea celui de al doilea termen se utilizează relația dualității $\epsilon\{V^2\} V[V^2] \sim V^2[V^2]$. Deoarece tensorul izotrop de simetrie internă $V^2[V^2]$ este dat de formula (48.7), pseudotensorul dual lui, $P_{[ij]k(lm)}$ este egal cu

$$\begin{aligned} P_{[ij]k(lm)} &= \delta_{ijn} [b\delta_{nk} \delta_{lm} + c(\delta_{nl} \delta_{km} + \delta_{nm} \delta_{kl})] = \\ &= b\delta_{ijk} \delta_{lm} + c(\delta_{ijl} \delta_{km} + \delta_{ijm} \delta_{kl}). \end{aligned} \quad (48.15)$$

Exact la fel găsim și dezvoltarea celui de al treilea termen

$$P_{(ij)k[lm]} = d\delta_{klm} \delta_{ij} + e(\delta_{ilm} \delta_{jk} + \delta_{jlm} \delta_{ik}). \quad (48.16)$$

În sfârșit, pentru scrierea celui de al patrulea termen, folosim relația $\epsilon\{V^2\} V\{V^2\} \sim \epsilon V^3$. Ea arată că pseudotensorul $P_{[ij]k[lm]}$ se poate exprima cu ajutorul unui pseudotensor de rangul trei. Deoarece $P_{[ij]k[lm]}$ este izotrop, pseudotensorul de rangul trei va fi tot izotrop și, prin urmare, va fi de forma $f\delta_{pqk}$. Deci

$$P_{[ij]k[lm]} = f\delta_{ijp} \delta_{pqk} \delta_{qlm} = f\delta_{ijp} (\delta_{pl} \delta_{km} - \delta_{pm} \delta_{kl}) = f(\delta_{ijl} \delta_{km} - \delta_{ijm} \delta_{kl}). \quad (48.17)$$

Adunînd egalitățile (48.14) — (48.17), obținem pentru pseudotensorul P_{ijklm} dezvoltarea

$$\begin{aligned} P_{ijklm} &= a(\delta_{ikl} \delta_{jlm} + \delta_{ikm} \delta_{jil} + \delta_{jkl} \delta_{ilm} + \delta_{jkm} \delta_{il}) + b\delta_{ijk} \delta_{lm} + \\ &+ (c + f) \delta_{ijl} \delta_{km} + (c - f) \delta_{ijm} \delta_{kl} + d\delta_{klm} \delta_{ij} + e(\delta_{ilm} \delta_{jk} + \delta_{jlm} \delta_{ik}) \end{aligned} \quad (48.18)$$

care, spre deosebire de (48.12) se exprimă prin șase coeficienți independenți, a, \dots, f . Sensul transformărilor efectuate constă în aceea că dezvoltarea pseudotensorului P_{ijklm} după termeni simetrici

și antisimetrice a permis aplicarea acestora din urmă relațiilor dualității, ceea ce a dat posibilitatea scrierii lui fără coeficienți inutili.

Deoarece grupul rotațiilor, $\infty\infty$, este un subgrup al grupului ortogonal $\infty\infty m$, toți tensorii și pseudotensorii, invarianți față de grupul ortogonal, adică izotropi, vor fi invarianți și față de grupul rotațiilor. Există însă și tensori, care, fiind invarianți față de grupul rotațiilor nu sînt totuși invarianți și față de grupul ortogonal. Asemenea tensori se numesc *tensori girotropi*. Toți tensorii girotropi au rang impar. Orice tensor girotrop de rangul r poate fi reprezentat sub formă de combinație liniară a izomerilor unui tensor

$$e_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5} \dots \delta_{i_{r-1} i_r}; \quad (48.19)$$

tensorul e , antisimetric în raport cu toți cei trei indici, este prezentat amănunțit în § 42. În sfîrșit, pseudotensorii girotropi sînt de rang par; orice pseudotensor de rang r , de acest fel, poate fi reprezentat sub formă de combinație liniară a izomerilor pseudotensorului

$$\psi \delta_{i_1 i_2} \dots \delta_{i_{r-1} i_r}, \quad (48.20)$$

unde ψ este un pseudotensor unitar, egal cu 1 într-un sistem de coordonate drept și cu -1 într-un sistem stîng.

Formulele (48.11) și (48.19) sînt liniare în raport cu pseudotensorul δ_{ijk} și, respectiv, cu tensorul e_{ijk} . Aceasta se explică prin faptul că combinațiile pătratice, formate din aceste mărimi, se exprimă, conform teoremei relativ la tensorii izotropi, prin tensorii Kronecker. În particular, pentru pseudotensorul Levi-Civita sînt valabile formulele

$$\delta_{ijk} \delta_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix}, \quad (48.21)$$

$$\delta_{ijm} \delta_{klm} = \delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (48.22)$$

$$\delta_{ikl} \delta_{jkl} = 2\delta_{ij}, \quad (48.23)$$

$$\delta_{ijk} \delta_{ijk} = 6. \quad (48.24)$$

Aceleași formule sînt adevărate și pentru combinațiile pătratice analoge, formate din componentele tensorului e_{ijk} . Formulele (48.21) — (48.24) pot fi utilizate și pentru combinațiile pătratice mixte: $\delta_{ijk} e_{lmn}$, $\delta_{ijm} e_{klm}$ etc., în acest caz însă membrii din dreapta trebuind să fie înmulțiți cu pseudoscalarul unitar ψ .

§ 49. DEFORMĂRI MICI ALE MEDIULUI CONTINUU

În cazul deformării mediului continuu — indiferent dacă acesta este izotrop sau anizotrop — particulele mediului se deplasează, în general, din pozițiile lor inițiale : o particulă care se afla pînă la deformare în punctul \mathbf{r} , de coordonate x_i , va ajunge, datorită deformării, în punctul \mathbf{r}' , de coordonate x'_i . Vectorul

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}, \quad u_i = x'_i - x_i \quad (49.1)$$

se numește *vectorul deplasare*. Evident, dacă în întregul volum ocupat de corp este definit un câmp vectorial, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, atunci starea deformată a corpului este complet determinată. Însă pentru o descriere mai intuitivă a deformării este mai convenabil să se utilizeze alte câmpuri vectoriale și tensoriale deduse din câmpul deplasării. Pentru a reprezenta deformarea unui mediu continuu, trebuie analizată o particulă a mediului împreună cu vecinătatea infinit mică a ei. Deformarea corpului din apropierea particulei date este convenabil să o reprezentăm descompusă în următoarele trei mișcări : 1) o mișcare de translație a particulei, împreună cu vecinătatea sa, dintr-un punct \mathbf{r} în punctul \mathbf{r}' ; 2) o rotație a vecinătății ca corp solid, în jurul unei anumite axe, care trece prin particulă, adică prin punctul \mathbf{r}' ; 3) o deformare propriu-zisă, adică o astfel de deplasare a unor particule ale vecinătății față de celelalte, încît distanța dintre particule se modifică.

Mișcarea de translație a particulei împreună cu vecinătatea este definită de vectorul $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Celelalte două mișcări sînt determinate de derivatele în funcție de coordonate ale vectorului deplasare. Aceste două derivate constituie *tensorul distorsiunii*, $\boldsymbol{\gamma} = \partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r}$, de componente $\gamma_{ik} = \partial u_i / \partial x_k$, fiind, în general, un tensor antisimetric. Tensorul distorsiunii se poate descompune, folosind tensorul transpus, $\boldsymbol{\gamma}^* = \text{Grad } \mathbf{u}$, într-o parte simetrică,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} + \text{Grad } \mathbf{u} \right) = \text{Def } \mathbf{u}, \quad \varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right), \quad (49.2)$$

denumită *tensorul micilor deformări*, și o parte antisimetrică,

$$\omega = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} - \text{Grad } \mathbf{u} \right), \quad \omega_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right), \quad (49.3)$$

denumită *tensorul micilor rotații*. În cazul unor deformări ale cristalelor, care nu le afectează integritatea, toate componentele tensorului distorsiunii vor fi, de obicei, mici : $|\gamma_{ik}| \ll 1$, fiind deci mici și toate componentele tensorilor ε și ω . Numai asemenea deformări vor fi analizate.

În vecinătatea particulei materiale, care înainte de deformare se afla în punctul \mathbf{r} , deplasările sînt egale cu

$$\mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \cdot \delta \mathbf{r} = \mathbf{u}(\mathbf{r}) + \omega \cdot \delta \mathbf{r} + \varepsilon \cdot \delta \mathbf{r}, \quad (49.4)$$

$$u_i(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) + \frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_k} \delta x_k = u_i(\mathbf{r}) + \omega_{ik} \delta x_k + \varepsilon_{ik} \delta x_k.$$

Aici $\omega = \omega(\mathbf{r})$ și $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$. Deplasările $\delta \mathbf{u}$ ale particulelor vecinătății față de particula aleasă de noi, care se afla pînă în momentul deformării în punctul \mathbf{r} , sînt egale cu

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \omega \cdot \delta \mathbf{r} + \varepsilon \cdot \delta \mathbf{r}, \quad (49.5)$$

$$\delta u_i(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - u_i(\mathbf{r}) = \omega_{ik} \delta x_k + \varepsilon_{ik} \delta x_k.$$

După cum s-a arătat în § 42, unui tensor antisimetric, ω , i se poate pune în corespondență vectorul axial $\vec{\phi}$, dualul său, denumit *vectorul micilor rotații*, de componente

$$\phi_i = -\frac{1}{2} \delta_{ijk} \omega_{jk}, \quad (49.6)$$

iar

$$\omega \cdot \delta \mathbf{r} = \vec{\phi} \times \delta \mathbf{r}.$$

Rezultă că

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = \vec{\phi} \times \delta \mathbf{r} + \varepsilon \cdot \delta \mathbf{r}. \quad (49.7)$$

Pentru a elucida sensul geometric al tensorului micilor rotații, vom presupune că $\varepsilon(\mathbf{r}) = 0$. Dacă $\delta \rho$ este o componentă a vectorului $\delta \mathbf{r}$, perpendiculară pe vectorul $\vec{\phi}$, atunci

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = \vec{\phi} \times \delta \rho; \quad \delta u = \rho \delta \phi.$$



Însă aceasta înseamnă că deplasarea fiecărui punct al vecinătății, $\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$, este proporțională cu distanța $\delta\mathbf{p}$ de la punctul $\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$ pînă la axa care trece prin punctul \mathbf{r} , paralelă cu vectorul $\mathring{\Phi}$. Totodată, direcția acestei deplasări este perpendiculară atît pe axă, cît și pe vectorul $\delta\mathbf{p}$, care unește această axă cu punctul considerat al vecinătății. Este evident că aceasta înseamnă rotația întregii vecinătăți ca un întreg în jurul axei de rotație. Nu prezintă nici o dificultate, de asemenea, să ne convingem că atît unghiul (în radiani), cît și sensul acestei rotații coincid cu lungimea și, respectiv, cu direcția vectorului axial, $\mathring{\Phi}$.

Substituind în (46.9) componentele tensorului micilor rotații, (49.3), obținem

$$\varphi_i = -\frac{1}{4} \delta_{ijk} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}.$$

În al doilea termen schimbăm între ei locul indicilor muți, aplicînd apoi identitatea $\delta_{ikj} = -\delta_{ijk}$

$$-\frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = -\frac{1}{4} \delta_{ikj} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \frac{1}{4} \delta_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}.$$

Deci,

$$\varphi_i = \frac{1}{2} \delta_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}, \quad \mathring{\Phi} = \frac{1}{2} \text{rot } \mathbf{u}. \quad (49.8)$$

Pentru elucidarea sensului geometric al tensorului ε vom lua $\omega(\mathbf{r}) = 0$. Atunci

$$\delta u(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \varepsilon \cdot \delta\mathbf{r}.$$

Ca orice tensor simetric de rangul doi, ε poate fi scris sub forma

$$\varepsilon = \varepsilon_{(1)} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 + \varepsilon_{(2)} \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 + \varepsilon_{(3)} \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3 \quad (\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j = \delta_{ij}).$$

Vom considera mai întîi cazul în care

$$\varepsilon_{(1)} = \varepsilon \neq 0, \quad \varepsilon_{(2)} = \varepsilon_{(3)} = 0.$$

Notăm $\mathbf{p}_1 \cdot \delta\mathbf{r} = \delta x_1$. Evident, în acest caz,

$$\delta u(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \varepsilon \delta x_1 \mathbf{p}_1.$$

Aceasta înseamnă că deplasările tuturor punctelor vecinătății sînt paralele cu vectorul \mathbf{p}_1 , fiind proporționale cu distanțele dintre punctele corespunzătoare și planul perpendicular pe acest vector, $\delta x_1 = 0$. Prin urmare, în acest caz se produce o alungire în direcția paralelă cu \mathbf{p}_1 , în raportul $(1 + \varepsilon) : 1$.

În cazul general, cînd toate valorile proprii ale tensorului ε sînt diferite de zero, se produce o suprapunere de astfel de alungiri după trei direcții rectangulare, așa cum se arată în figura 49.1.

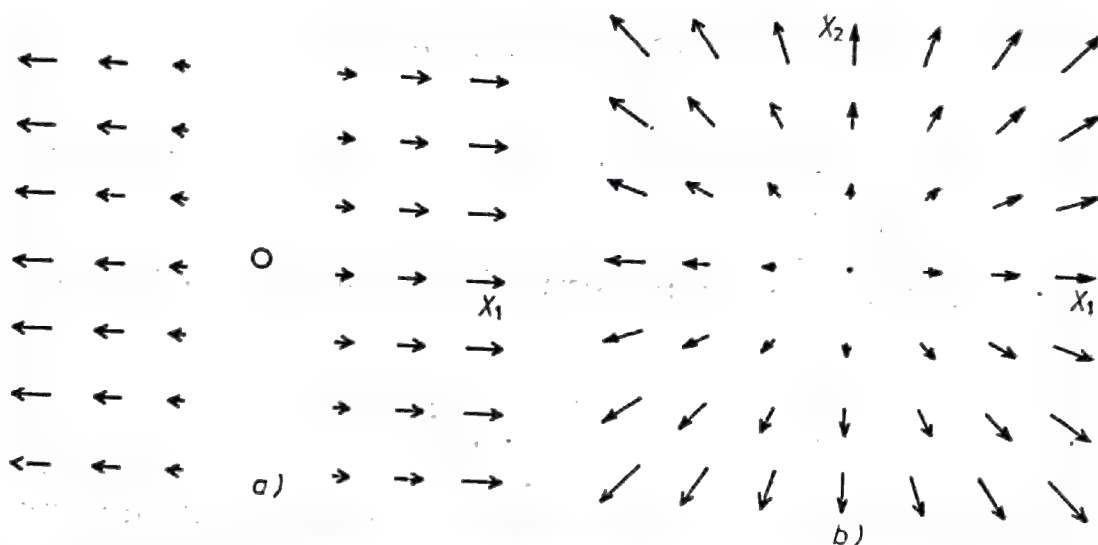


Fig. 49.1. Cîmpurile vectorului deplasare, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, pentru diferite deformări omogene :
a) $\varepsilon = 0,2 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1$; b) $\varepsilon = 0, 2(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2)$; c) $\varepsilon = 0,2 (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2)$; d) $\varepsilon = 0,2 (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1)$.

Să studiem cum variază distanțele după direcția unui vector unitar, oarecare, \mathbf{n} . Pentru aceasta va trebui să calculăm cum variază, ca urmare a deformării, distanța dintre punctul \mathbf{r} și punctul $\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}$, cînd $\delta \mathbf{r} = \mathbf{n} \delta s$. Înainte de deformare această distanță era egală cu δs . Ca urmare a deformării, punctul $\mathbf{r} + \mathbf{n} \delta s$ se deplasează față de punctul \mathbf{r} cu vectorul $\delta \mathbf{u} = \varepsilon \cdot \mathbf{n} \delta s$. Componenta acestui vector în direcția \mathbf{n} este egală cu

$$\mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} = \mathbf{n} \cdot \varepsilon \cdot \mathbf{n} \cdot \delta s.$$

Variația relativă a distanței în direcția \mathbf{n} , ca rezultat al micii deformări, ε , este deci

$$\frac{\mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u}}{\delta s} = \mathbf{n} \cdot \varepsilon \cdot \mathbf{n} = \varepsilon_{ik} n_i n_k, \quad (49.9)$$

\mathbf{n} fiind vectorul unitar.

Este interesant de calculat și variația, în cadrul deformării, a volumului. Dacă în vecinătatea punctului r luăm un paralelipiped mic, cu muchiile paralele cu vectorii proprii ai tensorului ε (această presupunere se face numai pentru simplificarea calculelor; s-ar fi putut studia un mic paralelipiped complet arbitrar, rezultatul fiind același) și egale cu l_1, l_2, l_3 , atunci ca rezultat al deformării, el se va transforma tot într-un paralelipiped cu laturile

$$l'_1 = (1 + \varepsilon_{(1)})l_1, \quad l'_2 = (1 + \varepsilon_{(2)})l_2, \quad l'_3 = (1 + \varepsilon_{(3)})l_3,$$

astfel încît variația relativă a volumului este

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{l'_1 l'_2 l'_3 - l_1 l_2 l_3}{l_1 l_2 l_3} = (1 + \varepsilon_{(1)}) (1 + \varepsilon_{(2)}) (1 + \varepsilon_{(3)}) - 1.$$

Dacă se neglijează termenii pătratici și cubici în $\varepsilon_{(i)}$, atunci

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{(1)} + \varepsilon_{(2)} + \varepsilon_{(3)} = \varepsilon_{kk}. \quad (49.10)$$

Această expresie, după cum și era de așteptat, nu depinde de alegerea sistemului de coordonate, fiind un invariant al tensorului deformării. Expresia poate fi exprimată prin vectorul deplasare

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{kk} = \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \operatorname{div} \mathbf{u}. \quad (49.11)$$

Este instructiv și calculul variației, ca urmare a deformării, a unghiului dintre doi vectori unitari, \mathbf{p} și \mathbf{q} , care inițial erau ortogonali ($\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = 0$). După deformare, cosinusul unghiului dintre ei este aproximativ egal cu

$$\cos \theta \approx (\mathbf{p} + \varepsilon \cdot \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{q} + \varepsilon \cdot \mathbf{q}) \approx 2\mathbf{p} \cdot \varepsilon \cdot \mathbf{q}$$

(am folosit aici nu numai faptul că tensorul ε este mic, ci și faptul că el este simetric). Prin urmare,

$$\theta \approx \frac{\pi}{2} - 2\mathbf{p} \cdot \varepsilon \cdot \mathbf{q}. \quad (49.12)$$

Partea sferică, $1/3 \varepsilon_{kk} \mathbf{I}$, a tensorului deformărilor, ε , definește o aceeași variație a volumului ca și tensorul deformărilor

însuși, însă aplicarea tensorului sferic nu schimbă forma : toate dreptele care erau ortogonale pînă la deformare, rămîn la fel și după aceasta : dacă $\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = 0$, atunci și

$$\mathbf{p} \cdot \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \mathbf{I} \cdot \mathbf{q} = \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = 0.$$

Din contra, deviatorul tensorului deformărilor,

$$\mathbf{e} = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \mathbf{I}, \quad e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \delta_{ij}, \quad (49.13)$$

definește deformarea care se produce fără variația volumului (deoarece $e_{kk} = 0$) ; modificările însă ale formei, adică modificarea unghiurilor, inițial drepte, dintre vectorii ortogonali, sub acțiunea deformărilor $\boldsymbol{\varepsilon}$ și \mathbf{e} , sînt aceleași : dacă $\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = 0$, atunci

$$\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{q} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{q}.$$

Fiind dat orice cîmp al deplasărilor, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, se poate determina cîmpul deformațiilor, $\boldsymbol{\varepsilon} = \text{Def } \mathbf{u}$. Se pune problema dacă cîmpul vectorial $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ poate fi reconstituit plecînd de la orice cîmp tensorial, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$, cu alte cuvinte, dacă orice cîmp tensorial este o deformație a unui anumit cîmp vectorial (se presupune că u_i și ε_{jk} sînt niște funcții de coordonate suficient de netede). O situație asemănătoare apare și în electrostatică : oricărei funcții scalare, $\varphi(\mathbf{r})$, îi corespunde un cîmp vectorial, $\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi$, dar nici pe departe orice cîmp vectorial nu va fi gradientul unui anumit cîmp scalar ; după cum se știe, pentru aceasta, cîmpul vectorial trebuie să fie fără vîrtejuri : $\text{rot } \mathbf{E} = 0$. Ne putem aștepta ca și cîmpul tensorial, pentru a servi drept deformație unui cîmp vectorial oarecare, să fie necesar să satisfacă anumite condiții. Să le deducem.

Să examinăm cazul $\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon}$. Conform definiției,

$$(\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon})_{ij} = \delta_{ijk} \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x_k}. \quad (49.14)$$

Vom exprima componentele acestui pseudotensor prin derivatele vectorului deplasare

$$\delta_{ikl} \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x_k} = \frac{1}{2} \delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_j} + \frac{1}{2} \delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l}.$$

Termenul al doilea este identic egal cu zero, deoarece funcția $u_j(r)$ satisface cerințele teoremei asupra schimbării ordinii de diferențiere. Într-adevăr, în acest caz, tensorul $\partial^2 u_j / \partial x_k \partial x_l$ este simetric în raport cu indicii k și l . Tensorul δ_{ikl} este însă antisimetric în raport cu acești indici. De aici se vede imediat că

$$\delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} = 0.$$

Dar

$$\delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} = (\text{Rot Grad } u)_{ij},$$

astfel încît am obținut formula din analiza tensorială

$$\text{Rot Grad} = 0. \quad (49.15)$$

Remarcînd că

$$\delta_{ikl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} = (\text{rot } u)_i,$$

vom transcrie (49.14) în forma

$$(\text{Rot } \varepsilon)_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial (\text{rot } u)_i}{\partial x_j}, \quad \text{Rot } \varepsilon = \frac{1}{2} \frac{\partial (\text{rot } u)}{\partial r}, \quad (49.16)$$

Pe de altă parte, $1/2 \text{ rot } u = \overset{\circ}{\varphi}$. Obținem astfel o formulă foarte importantă

$$(\text{Rot } \varepsilon)_{ij} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}, \quad \text{Rot } \varepsilon = \frac{\partial \overset{\circ}{\varphi}}{\partial r}. \quad (49.17)$$

Această formulă este importantă prin ea însăși și vom mai apela la ea. Acum se deduce ușor relația căutată. Transpunem ambele părți ale egalității (49.17). Obținem

$$(\text{Rot } \varepsilon)^* = \text{Grad } \overset{\circ}{\varphi}.$$

Aplicăm acum ambelor părți ale egalității obținute operația Rot. Deoarece

$$\text{Rot } (\text{Rot } \varepsilon)^* = \text{Ink } \varepsilon$$

și, așa cum s-a menționat deja,

$$\text{Rot Grad} = 0,$$

vom obține în final

$$\text{Ink } \varepsilon = 0, \quad \delta_{ikm} \delta_{jln} \frac{\partial^2 \varepsilon_{mn}}{\partial x_k \partial x_l} = 0. \quad (49.18)$$

Am demonstrat astfel că dacă un câmp tensorial este o deformare a unui anumit câmp vectorial, atunci incompatibilitatea se anulează. Ecuația (49.18) se numește *ecuația de compatibilitate Saint-Venant*.

Să examinăm ecuația de compatibilitate a deformărilor pentru cazul în care tensorul deformărilor depinde numai de o singură coordonată, să zicem de x_3 . Atunci

$$\frac{d^2 \varepsilon_{11}}{dx_3^2} = \frac{d^2 \varepsilon_{22}}{dx_3^2} = \frac{d^2 \varepsilon_{12}}{dx_3^2} = 0, \quad (49.19)$$

iar celelalte trei ecuații de compatibilitate sînt satisfăcute identic. Din ecuațiile (49.19) rezultă că ε_{11} , ε_{22} , și ε_{12} depind liniar de x_3

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta} + B_{\alpha\beta} x_3 \quad (\alpha, \beta = 1, 2; A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}, B_{\alpha\beta} = B_{\beta\alpha}). \quad (49.20)$$

În cazul în care tensorul deformărilor depinde numai de o singură coordonată, toate ecuațiile de compatibilitate se reduc la relațiile (49.20).

§ 50. TENSORUL TENSIUNILOR

Cînd un cristal este deformat apar forțe care tind să restabilească configurația inițială. Aceste forțe, după cum arată teoria rețelei cristaline, sînt forțe cu rază de acțiune mică, raza efectivă de acțiune a lor, nedepășind cîteva constante de rețea (aici nu avem în vedere cristalele piezoelectrice, ale căror proprietăți vor fi studiate separat). Volumele elementare, utilizate în teoria mediilor continue, fiind însă mari în comparație cu celulele elementare ale unui cristal, trebuie considerat că forța care acționează ca rezultat al deformării asupra oricărui volum pe care ni-l imaginăm în cristal, se transmite numai prin suprafața care mărginește acest volum. Atunci starea de tensiune din orice punct (prin punct, ca totdeauna în mecanica mediilor continue, se înțelege un volum elementar) al cristalului este definită de totalitatea for-

țelor, PdS , care acționează asupra tuturor suprafețelor posibile care trec prin acest punct, avînd vectorul unitar al normalei exterioare, n , și aria dS (vectorul P are dimensiunea unei tensiuni mecanice : forță/suprafață).

Prin urmare, starea de tensiune dintr-un punct se definește prin funcția $P(n)$ sau, introducînd notațiile

$$F = PdS, N = ndS$$

prin funcția $F(N)$. Vom demonstra că această funcție este liniară. Egalitatea $F(\lambda N) = \lambda F(N)$, unde λ este un număr real arbitrar (însă nu prea mare), rezultă direct din definiția vectorilor F și N . Să ne imaginăm acum că o suprafață plană, de dimensiuni mici, caracterizată prin vectorul N , este înlocuită printr-o suprafață cu nervuri, foarte apropiată de ea, fiecare porțiune separată a sa caracterizîndu-se prin vectorii N_s . Studiul geometric arată că în acest caz $\Sigma N_s = N$. Din considerente fizice este evident, pe de altă parte, că forța rezultantă, care acționează pe o suprafață de dimensiuni mici, nu poate să difere substanțial ca mărime dacă suprafața are nervuri sau este plană, deci

$$\Sigma F(N_s) = F(N).$$

Reunind aceste două egalități, obținem

$$F(\Sigma N_s) = \Sigma F(N_s)$$

ceea ce era de demonstrat.

Deoarece vectorul F este o funcție liniară de vectorul N , va exista un tensor de rangul doi, σ , care nu depinde de N , astfel încît $F = \sigma \cdot N$ (vezi § 18), sau, revenind la notațiile inițiale,

$$P = \sigma \cdot n, \quad P_i = \sigma_{ij} n_j. \quad (50.1)$$

Tensorul σ se numește *tensorul tensiunilor*; definind complet funcția $P(n)$, el caracterizează complet starea de tensiune dintr-un punct. Pentru a găsi acest tensor este suficient să măsurăm forțele $P^{(k)}$, care acționează pe trei suprafețe mici, care au normalele $n^{(k)}$ necoplanare; atunci componentele σ_{ij} vor fi soluții ale sistemului de nouă ecuații liniare

$$n_j^{(k)} \sigma_{ij} = P_i^{(k)}. \quad (50.2)$$

Fie, în particular, normalele la suprafețe paralele cu versorii : $n^{(k)} = e_k$. Atunci $n_j^{(k)} = \delta_{jk}$ astfel încît sistemul (50.2) capătă forma

$$\sigma_{ik} = P_i^{(k)}. \quad (50.3)$$



Prin urmare, σ_{ik} este componenta i a forței aplicate suprafeței unitare, a cărei normală exterioară este orientată după axa X_k .

Deoarece forța care acționează pe 1 cm^2 de suprafață, avînd normala exterioară \mathbf{n} , este $\mathbf{P} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, componenta normală a acestei forțe va fi

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \sigma_{ik} n_i n_k,$$

componenta de forfecare, totală (adică cea care se află în planul suprafeței) fiind

$$\mathbf{P} - \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{P} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}.$$

Tensiunea de forfecare după o direcție dată, \mathbf{l} , este egală cu

$$\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \sigma_{ik} l_i n_k;$$

vectorul unitar, \mathbf{l} , se află în planul suprafeței, fiind deci perpendicular pe vectorul \mathbf{n} .

Să ne imaginăm că am delimitat dintr-un corp un volum oarecare, V , mărginit de suprafața S . Dacă asupra fiecărui element de suprafață dS acționează o forță

$$\mathbf{P} dS = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS,$$

atunci asupra întregului volum acționează forța

$$\mathbf{F} = \oint_S \mathbf{P} dS = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS, \quad F_i = \oint_S P_i dS = \oint_S \sigma_{ik} n_k dS. \quad (50.4)$$

Integrala pe suprafața închisă poate fi, conform teoremei Gauss-Ostrogradski (vezi § 43) transformată într-o integrală după volumul mărginit de această suprafață

$$\mathbf{F} = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{Div } \boldsymbol{\sigma}^* dV, \quad F_i = \oint_S \sigma_{ik} n_k dS = \int_V \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV. \quad (50.5)$$

Pe de altă parte, conform legii a doua a lui Newton,

$$\mathbf{F} = \int_V \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} dV, \quad F_i = \int_V \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} dV. \quad (50.6)$$



Comparînd aceste relații cu (50.5) obținem

$$\int_V \text{Div } \sigma^* dV = \int_V \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} dV, \quad \int_V \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \int_V \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} dV.$$

Deoarece această egalitate este satisfăcută oricum am lua volumul V , trebuie ca expresiile de sub integrale să fie egale

$$\text{Div } \sigma^* = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (50.7)$$

Acestea sînt ecuațiile de mișcare ale corpului elastic — așa-numitele ecuații ale *elastodinamicii*, sau ecuațiile lui *Cauchy*. Ecuațiile de echilibru al corpului, ecuațiile *elastostaticii*,

$$\text{Div } \sigma^* = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0, \quad (50.8)$$

reprezintă un important caz particular al ecuațiilor elastodinamicii. Dacă asupra unui corp acționează încă o forță de volum, f (dimensiunea acestui vector este forță/volum) ea trebuie să fie adăugată părților stîngi ale ecuațiilor (50.7) și (50.8). De exemplu, în prezența forțelor de volum, ecuațiile Cauchy capătă forma

$$\text{Div } \sigma^* + f = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (50.9)$$

Să calculăm acum momentul forțelor care acționează asupra volumului V , teoretic delimitat de noi, care are suprafața S . Considerînd forțele de volum, el va fi egal cu

$$M = \oint_S r \times P dS + \int_V r \times f dV, \quad (50.10)$$

$$M_i = \oint_S \delta_{ijk} x_j P_k dS + \int_V \delta_{ijk} x_j f_k dV.$$

Efectuarea calculelor ce urmează este mai comodă în forma cu coordonate. Să împărțim forțele de suprafață P_k la tensorul

tensiunilor și să transformăm integrala de suprafață într-o integrală de volum

$$\oint_S x_j P_k dS = \oint_S x_j \sigma_{kl} n_l dS = \int_V \frac{\partial (x_j \sigma_{kl})}{\partial x_l} dV.$$

Observind că

$$\frac{\partial (x_j \sigma_{kl})}{\partial x_l} = x_j \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + \sigma_{kl} \frac{\partial x_j}{\partial x_l},$$

iar

$$\frac{\partial x_j}{\partial x_l} = \delta_{jl},$$

precum și

$$\sigma_{kl} = \frac{\partial x_j}{\partial x_l} = \sigma_{kj},$$

transcriem formula (50.10) în forma

$$M_i = \int_V \delta_{ijk} x_j \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + f_k \right) dV + \int_V \delta_{ijk} \sigma_{kj} dV. \quad (50.11)$$

În expresia de sub prima integrală, suma care se află între paranteze este egală cu forța care acționează asupra unității de volum a corpului (de comparat cu ecuația (50.9)), iar întreaga expresie de sub integrală este egală cu momentul forței. Prin urmare, întreaga acțiune a momentelor forțelor de suprafață și a celor de volum asupra volumului considerat se reduce la prima integrală, iar cea de a doua trebuie să fie egală cu zero. În virtutea faptului că volumul V este arbitrar, rezultă că se anulează expresia de sub integrală

$$\delta_{ijk} \sigma_{kj} = 0. \quad (50.12)$$

Acestea sînt cele trei egalități care arată că tensorul tensiunilor, σ , este simetric. Într-adevăr, dezvoltînd-o pe prima dintre ele, obținem

$$\delta_{1jk} \sigma_{kj} = \sigma_{32} - \sigma_{23} = 0,$$

iar a doua și a treia dau

$$\sigma_{13} - \sigma_{31} = 0, \quad \sigma_{21} - \sigma_{12} = 0.$$

În ultimul timp se studiază modele ale mediilor continue cu grade de libertate interne, în care tensorul tensiunilor poate fi și nesimetric. Să ne imaginăm, de exemplu, un mediu continuu, în care sînt implantate uniform particule care se pot roti față de mediu, iar ca urmare a unei astfel de rotații, în mediu apar forțe care tind să readucă particulele în poziția inițială. Astfel sînt, de pildă, particulele magnetizate sau cele polarizate electric, implantate în mediul continuu. Dacă unui asemenea mediu i se aplică un câmp electric sau unul magnetic, asupra fiecărei particule va acționa un moment de rotație; suma tuturor momentelor care acționează asupra particulelor care se află în unitatea de volum se numește *momentul de volum*, \mathbf{m} . În afară de aceasta, momentul poate fi transmis prin suprafață: pe unitatea de suprafață, care are normala exterioară \mathbf{n} , acționează un moment de suprafață, \mathbf{Q} , legat de pseudotensorul momentelor tensiunilor, $\boldsymbol{\mu}$, exact la fel ca și forțele de suprafață, \mathbf{P} , cu tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$,

$$\mathbf{Q} = \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n}.$$

Pentru un asemenea mediu, formula (50.10) se înlocuiește cu următoarea relație

$$M_i = \oint_S \delta_{ijk} x_j P_k dS + \int_V \delta_{ijk} x_j f_k + \oint_S Q_i dS + \int_V m_i dV.$$

Atunci, în loc de (50.11) obținem

$$M_i = \int_V \delta_{ijk} x_j \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + f_k \right) dV + \int_V \left(-\frac{\partial \mu_{il}}{\partial x_l} + m_i - \delta_{ijk} \sigma_{jk} \right) dV.$$

Evident, expresia de sub a doua integrală are sensul de moment rezultat, care acționează asupra particulelor conținute în unitatea de volum. Datorită faptului că momentele de inerție ale particulelor sînt mici, le putem considera egale cu zero, astfel încît partea antisimetrică a tensorului tensiunilor este egală cu

$$\delta_{ijk} \sigma_{jk} = \frac{\partial \mu_{il}}{\partial x_l} + m_i.$$

Prin urmare, partea antisimetrică a tensorului tensiunilor echilibrează momentele de volum și momentele datorate momentelor tensiunilor. În absența momentelor de volum și a momentelor tensiunilor, tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, este simetric. Vezi, asupra acestor probleme, Aero și Kuvșinski (1960), Kuvșinski și Aero (1963), Palmov (1964).

Să deducem valorile medii ale tensorului tensiunilor

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma} dV, \quad \langle \sigma_{ik} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ik} dV \quad (50.13)$$

și ale momentului său

$$\langle \mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma} dV, \quad \langle \delta_{ijk} x_j \sigma_{kl} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \delta_{ijk} x_j \sigma_{kl} dV \quad (50.14)$$

pentru un corp elastic, care se află în echilibru, sub acțiunea sarcinilor \mathbf{P} (mecanice), aplicate pe suprafața sa.

Să examinăm divergența

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (x_k \sigma_{ik}) = \frac{\partial x_k}{\partial x_i} \sigma_{ik} + x_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_i}.$$

Deoarece $\partial x_k / \partial x_i = \delta_{ki}$, primul termen este egal cu σ_{ik} . Al doilea termen este egal cu zero, în virtutea ecuațiilor de echilibru. De aceea, valoarea medie a tensorului tensiunilor se exprimă prin integrala de suprafață

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{ik} \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ik} dV = \frac{1}{V} \int_V (x_k \sigma_{ik}) dV = \\ &= \frac{1}{V} \oint_S x_k \sigma_{ik} n_i dS = \frac{1}{V} \oint_S P_i x_k dS. \end{aligned}$$

Așadar,

$$\langle \sigma_{ik} \rangle = \frac{1}{V} \oint_S P_i x_k dS, \quad \langle \sigma \rangle = \frac{1}{V} \oint_S \mathbf{P} \mathbf{r} dS. \quad (50.15)$$

Să examinăm acum divergența

$$\frac{\partial}{\partial x_m} (x_j x_i \sigma_{km}) = \frac{\partial x_j}{\partial x_m} x_i \sigma_{km} + x_j \frac{\partial x_i}{\partial x_m} \sigma_{km} + x_j x_i \frac{\partial \sigma_{km}}{\partial x_m}.$$

Raționînd ca în cazul precedent, vom găsi că

$$\frac{\partial}{\partial x_m} (x_j x_i \sigma_{km}) = x_i \sigma_{kj} + x_j \sigma_{ki}.$$

Observăm acum că

$$\delta_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_m} (x_j x_i \sigma_{km}) = \delta_{ijk} x_j \sigma_{ki},$$

deoarece $\delta_{ijk} \sigma_{kj} = 0$, ca urmare a faptului că tensorul tensiunilor este simetric. Aceasta ne permite să exprimăm prin integrala de suprafață și valoarea medie a momentului tensorului tensiunilor

$$\langle \delta_{ijk} x_j \sigma_{ki} \rangle = \frac{1}{V} \oint_S \delta_{ijk} x_j P_k x_i dS, \quad (50.16)$$

$$\langle \mathbf{r} \times \sigma \rangle = \frac{1}{V} \oint_S \mathbf{r} \times \mathbf{P} \mathbf{r} dS.$$

Prin urmare, valoarea medie a tensorului tensiunilor și a momentului său se pot determina din sarcinile de suprafață, fără a rezolva ecuațiile teoriei elasticității. Rezultatul obținut este important mai ales în cazurile în care suprafața corpului este liberă de sarcini. În acest caz câmpul tensorului tensiunilor este autoechilibrat: tensorul însuși poate fi diferit de zero, însă valoarea medie a lui și momentul său trebuie să fie egale cu zero. De aici rezultă, în particular, că dacă o componentă oarecare a tensorului (sau a momentului lui) nu este identic nulă, ea va lua în mod obligatoriu atât valori pozitive cât și valori negative.

§ 51. LEGEA GENERALIZATĂ A LUI HOOKE

Să calculăm lucrul forțelor exterioare, \mathbf{P} , aplicate pe suprafața S a unui corp elastic, al cărui volum este V . Dacă sub acțiunea acestor forțe punctele suprafeței suferă deplasări mici, $\delta \mathbf{u}$, atunci lucrul mecanic este

$$\delta \mathcal{A} = \oint_S \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{P} \, dS = \oint_S \delta u_i P_i \, dS.$$

Deoarece $\mathbf{P} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, \mathbf{n} fiind vectorul unitar al normalei exterioare la suprafața S , rezultă că

$$\delta \mathcal{A} = \oint_S \delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_S \delta u_i \sigma_{ij} n_j \, dS.$$

Să transformăm, ca și în § 50, integrala de suprafață într-o integrală de volum

$$\delta \mathcal{A} = \int_V \operatorname{div} (\delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta u_i \sigma_{ij}) \, dV.$$

Conform regulii de diferențiere a produsului,

$$\delta \mathcal{A} = \int_V \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} \sigma_{ij} \, dV + \int_V \delta u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \, dV. \quad (51.1)$$

Derivatele în raport cu spațiul ale micilor deplasări, $\partial(\delta u_i)/\partial x_j$, sînt egale cu micile distorsiuni, $\delta \epsilon_{ij} + \delta \omega_{ij}$, însă deoarece contracția tensorului antisimetric, $\delta \omega_{ij}$, cu tensorul simetric, σ_{ij} , este identic nulă, prima expresie de sub integrala (51.1) se reduce la $\sigma_{ij} \delta \epsilon_{ij}$.

Să trecem la cea de a doua integrală. Conform ecuațiilor elastodinamicii,

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \ddot{u}_i,$$

iar δu_i poate fi luat drept $\dot{u}_i \delta t$, δt fiind intervalul de timp în care se produce deplasarea δu . Mai departe,

$$\rho \ddot{u}_i u_i \delta t = \frac{1}{2} \rho \frac{\partial}{\partial t} (\dot{u}_i \dot{u}_i) \delta t,$$

dar aceasta nu este altceva decât variația energiei cinetice a unității de volum în timpul δt (în aproximația teoriei micilor deformări în procesul deformării densitatea ρ rămâne constantă). Prin urmare, cea de a doua integrală din (51.1) reprezintă, de fapt, variația energiei cinetice totale, \mathcal{K} , a corpului elastic. Prin urmare, lucrul mecanic al forțelor exterioare este

$$\delta \mathcal{A} = \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV + \delta \mathcal{K},$$

astfel încât acea parte din lucrul mecanic consumat, care este cheltuită pentru a produce deformarea mică, $\delta \varepsilon_{ij}$, a unității de volum a corpului (sau, mai general, pentru a modifica deformarea unității de volum cu o cantitate mică $\delta \varepsilon_{ij}$), este egală cu

$$\delta R = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}. \quad (51.2)$$

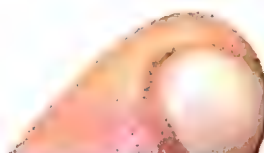
Corpurile elastice (mai exact, liniar-elastice) se caracterizează prin faptul că tensiunile din ele sînt proporționale cu deformările. În cazul cristalelor, aceasta înseamnă că tensorul tensiunilor depinde liniar de tensorul deformărilor, această dependență liniară

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad \sigma = c : \varepsilon, \quad (51.3)$$

fiind determinată de tensorul de material, c ; acesta se numește *tensorul coeficienților de elasticitate* sau *tensorul coeficienților de rigiditate* și se exprimă în dyn/cm^2 , kgf/cm^2 sau N/m^2 .

Pentru a calcula lucrul mecanic necesar pentru o variație finită a deformării unității de volum a unui corp elastic anizotrop, de la valoarea $\varepsilon^{(0)}$ pînă la valoarea sa $\varepsilon^{(1)}$, trebuie integrată expresia (51.2) ținînd cont de (51.3)

$$R = \int_{\varepsilon^{(0)}}^{\varepsilon^{(1)}} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} d\varepsilon_{ij}.$$



Această integrală depinde, în general, de drumul de integrare; o condiție ca integrala să nu depindă totuși de drumul de integrare este existența unei funcții $W(\epsilon)$, astfel încât

$$\mathbf{c} : \epsilon = \frac{\partial W}{\partial \epsilon}, \quad c_{ijkl} \epsilon_{kl} = \frac{\partial W}{\partial \epsilon_{ij}}. \quad (51.4)$$

Atunci lucrul deformării elastice a unității de volum va fi egal cu

$$R = \int_{\epsilon^{(0)}}^{\epsilon^{(1)}} c_{ijkl} \epsilon_{kl} d\epsilon_{ij} = W(\epsilon^{(1)}) - W(\epsilon^{(0)}),$$

astfel încât funcția $W(\epsilon)$ va reprezenta densitatea de energie a deformării elastice. În ipoteza cea mai firească, $W(0) = 0$, ea va fi egală cu

$$W = \frac{1}{2} c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} = \frac{1}{2} \epsilon : \mathbf{c} : \epsilon. \quad (51.5)$$

Din (51.4) mai rezultă, de asemenea, că

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}}, \quad \mathbf{c} = \frac{\partial^2 W}{\partial \epsilon \partial \epsilon}, \quad (51.6)$$

ceea ce înseamnă că $c_{ijkl} = c_{klij}$. Ținând cont și de simetria internă $[V^2]$, a tensorului ϵ ($\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$), obținem de aici că dacă relația (51.4) este satisfăcută, atunci simetria internă a tensorului \mathbf{c} este egală cu $[[V^2]^2]$:

$$c_{ijkl} = c_{jilk} = c_{ijlk} = c_{klij}. \quad (51.7)$$

Relația (51.4), așa cum rezultă însă din capitolul 7, este adevărată, în particular, în cazurile deosebit de importante cum ar fi deformarea adiabatică și deformarea izotermă a cristalului.

În formulele (51.3), (51.5) și (51.6) este comod să se înlocuiască perechile de indici ij și kl cu indicii λ și μ , care iau valorile $1, \dots, 6$. Metoda trecerii la o asemenea formă de scriere este expusă în anexa F. După aceasta, formulele vor căpăta, respectiv, forma

$$\sigma_\lambda = c_{\lambda\mu} \epsilon_\mu, \quad (51.3')$$

$$W = \frac{1}{2} c_{\lambda\mu} \epsilon_\lambda \epsilon_\mu, \quad (51.5')$$

$$c_{\lambda\mu} = \frac{\partial^2 W}{\partial \epsilon_\lambda \partial \epsilon_\mu}. \quad (51.6')$$

Relația (51.3) poate fi transformată, exprimând deformările în funcție de tensiuni

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad \varepsilon = s : \sigma, \quad \varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu} \sigma_\mu, \quad (51.8)$$

s fiind *tensorul coeficienților deformabilității elastice*; simetria lui internă, aceeași, evident, ca și a tensorului c , se exprimă în cm^2/dyn , cm^2/kgf sau m^2/N .

Relațiile (51.3) și (51.8) poartă numele de *legea generalizată a lui Hooke pentru mediile anizotrope*. Dacă este necesar să se țină cont și de dilatarea termică a cristalului, relațiile se completează cu termeni care depind de temperatură.

În cazul unei variații uniforme cu Θ grade a temperaturii, cristalul, fără a fi supus unor solicitări exterioare, suferă o deformare termică

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Theta, \quad \varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta,$$

α fiind denumit *tensorul coeficienților de dilatare termică*; evident, ca și tensorul ε , el este simetric; dimensiunea lui este grad^{-1} .

În cazul general, când cristalul este supus atât tensiunilor mecanice cât și variației de temperatură, tensorul micilor deformări este format din componente determinate de fiecare dintre aceste acțiuni, separat,

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl} + \alpha_{ij} \Theta, \quad \varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu} \sigma_\mu + \alpha_\lambda \Theta. \quad (51.9)$$

Atunci termenii de origine termică apar și în expresiile pentru tensiuni

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} - \beta_{ij} \Theta, \quad \sigma_\lambda = c_{\lambda\mu} \varepsilon_\mu - \beta_\lambda \Theta; \quad (51.10)$$

β se numește *tensorul coeficienților termoelasticității*; ca și α el este tot simetric.

Să deducem relația dintre tensorii de material, care intră în legea generalizată a lui Hooke, și termenii care apar datorită temperaturii, (51.9) și (51.10). Înlocuind în formula (51.10) deformările, exprimate prin intermediul formulei (51.9), obținem

$$\sigma_\lambda = c_{\lambda\mu} s_{\mu\nu} \sigma_\nu - (\beta_\lambda - c_{\lambda\mu} \alpha_\mu) \Theta.$$

Deoarece această identitate trebuie să fie satisfăcută pentru orice valori ale tensiunilor, σ_λ , și ale temperaturilor, Θ , din ea rezultă direct relațiile căutate

$$c_{\lambda\mu} s_{\mu\nu} = \delta_{\lambda\nu}, \quad c_{ijkl} s_{klmn} = \frac{1}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}), \quad (51.11)$$

$$\beta_\lambda = c_{\lambda\mu} \alpha_\mu, \quad \beta_{ij} = c_{ijkl} \alpha_{kl}. \quad (51.12)$$

În cadrul expresiilor matematice ale legii Hooke, (51.3) și (51.10) (dar nu (51.8) și (51.9)!) tensorul deformărilor poate fi înlocuit prin tensorul distorsiunilor, $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r}$, sau cu tensorul transpus al acestuia, Grad \mathbf{u} (vezi § 49). Este vorba aici despre faptul că

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} - \boldsymbol{\omega} = \text{Grad } \mathbf{u} + \boldsymbol{\omega},$$

iar tensorul micilor rotații, $\boldsymbol{\omega}$, fiind antisimetric, prin contracția după ultima pereche de indici cu tensorul simetric \mathbf{c} dă zero

$$c_{ijkl} \omega_{kl} = 0, \quad \mathbf{c} : \boldsymbol{\omega} = 0.$$

Deci, legea Hooke, (51.3), poate fi scrisă sub forma

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{c} : \text{Grad } \mathbf{u}. \quad (51.13)$$

Substituind aceste expresii în (50.7), obținem ecuațiile de mișcare ale corpului elastic (ecuațiile *elastodinamicii*)

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad \mathbf{c} : \text{Grad Grad } \mathbf{u} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}, \quad (51.14)$$

și substituindu-le în (50.8), obținem ecuațiile echilibrului elastic (ecuațiile *elastostaticii*)

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = 0, \quad \mathbf{c} : \text{Grad Grad } \mathbf{u} = 0. \quad (51.15)$$

Acesta este un sistem de trei ecuații diferențiale, liniare, cu derivate parțiale, de ordinul doi, cu trei necunoscute. El este adecvat pentru rezolvarea problemelor de teoria elasticității în acele cazuri în care condițiile la limită sînt date pentru deplasări. De cele mai multe ori însă condițiile la limită sînt date pentru tensiuni, adică se dau forțele aplicate suprafeței cristalului. Subliniem faptul că condițiile la limită pe porțiunile din suprafața cristalului ce nu sînt supuse solicitărilor se dau anume pentru tensiuni: cu toate că forțele aplicate acestor părți ale suprafeței sînt egale cu zero, deplasările sînt însă aici, în general vorbind, diferite de zero.

În cazul în care sînt date condițiile la limită pentru tensiuni, este mai comod să se scrie ecuațiile diferențiale ale teoriei elasticității într-o formă în care funcțiile necunoscute să fie componente ale tensiunilor σ . După cum știm, ele trebuie să satisfacă ecuațiile echilibrului elastic ale lui Cauchy, (50.8), pe cînd componentele tensorului de deformare, ε , obținute din ele aplicînd legea Hooke satisfac ecuațiile de compatibilitate Saint-Venant, (49.18). Astfel, se ajunge la un sistem de nouă ecuații diferențiale în cele șase funcții necunoscute, $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ (ecuațiile (51.17) se numesc ecuațiile Beltrami-Mitchell extinse pentru cazul corpului anizotrop)

$$\text{Div } \sigma = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad (51.16)$$

$$\text{Ink } (s : \sigma) = 0, \quad \delta_{ikn} \delta_{jlm} s_{mnpq} \frac{\partial^2 \sigma_{pq}}{\partial x_k \partial x_l} = 0, \quad (51.17)$$

cu trei condiții la limită

$$\sigma \cdot n = P, \quad \sigma_{ij} n_j = P_i, \quad (51.18)$$

unde P este o funcție vectorială de coordonate, dată pe întreaga suprafață a corpului elastic. Se poate demonstra (v. Leibenzon, 1947, § 118, și Novojilov, 1958, cap. V, § 18) că acest sistem are întotdeauna soluție, fiind totodată unică.

Legea lui Hooke este scrisă fără termenii care depind de temperatură; rezultă deci că ecuațiile reduse exprimă echilibrul elastic al unui cristal, cînd temperatura este constantă. Calculul dilatării termice a unui cristal și tensiunile datorate temperaturii, legate de dilatare, le rezervăm pentru § 55.

Pentru rezolvarea ecuațiilor teoriei elasticității în tensiuni, pentru cazurile mai complicate, se utilizează, de obicei, tensorul funcțiilor tensiunilor, Φ . Acesta este un tensor simetric de rangul doi, legat de tensorul tensiunilor, σ , prin relația

$$\sigma = \text{Ink } \Phi.$$

Se poate verifica ușor că

$$\text{Div } \text{Ink } \Phi = 0,$$

astfel încît ecuațiile echilibrului elastic ale lui Cauchy sînt satisfăcute identic, pentru determinarea lui Φ fiind suficient să se rezolve sistemul de ecuații

$$\text{Ink } (s : \text{Ink } \Phi) = 0,$$

cu condițiile la limită,

$$n \cdot \text{Ink } \Phi = P.$$

Tensorul funcțiilor tensiunilor nu este univoc determinat în acest caz, ci numai cu o exactitate de pină la un termen de forma $\text{Def } v$, v fiind un vector arbitrar. Această neunivocitate este totuși complet neesențială, pentru că din ecuațiile de compatibilitate ale lui Saint-Venant rezultă că

$$\text{Ink Def} = 0.$$

Prin urmare, tensorul tensiunilor, σ , este determinat, în ultimă instanță, complet univoc. Amănunte în legătură cu aceasta sînt în lucrările lui Lure (1955, cap. I, § 5) și Krutkov (1949). În general pentru rezolvarea problemelor de teorie a elasticității anizotrope, pot fi consultate lucrările lui Lekhnitski (1947, 1950, 1971) și Ambarzumian (1967). Menționăm în mod special problema construirii tensorului Green pentru sistemul de ecuații ale elastostaticii cristalelor, (51.15) — pentru aceasta se mai poate consulta lucrarea lui Lifșiț și Rozențveig (1947).

§ 52. SIMETRIA PROPRIETĂȚILOR ELASTICE ALE CRISTALELOR

În § 51 au fost deduși tensorii de material s , c , α și β , care caracterizează proprietățile elastice, dilatarea termică și termoeleasticitatea cristalelor. Tensorii α și β sînt tensori simetrici de rangul doi; influența simetriei cristalelor asupra proprietăților descrise de acești tensori a fost studiată amănunțit în capitolul 3. În figurile 24.1, 24.2 și 24.3 sînt prezentate suprafețele dilatării termice ale unor cristale. Spre deosebire de tensorii permitivității dielectrice, conductibilității termice și conductibilității electrice, tensorul dilatării termice poate avea și valori proprii negative.

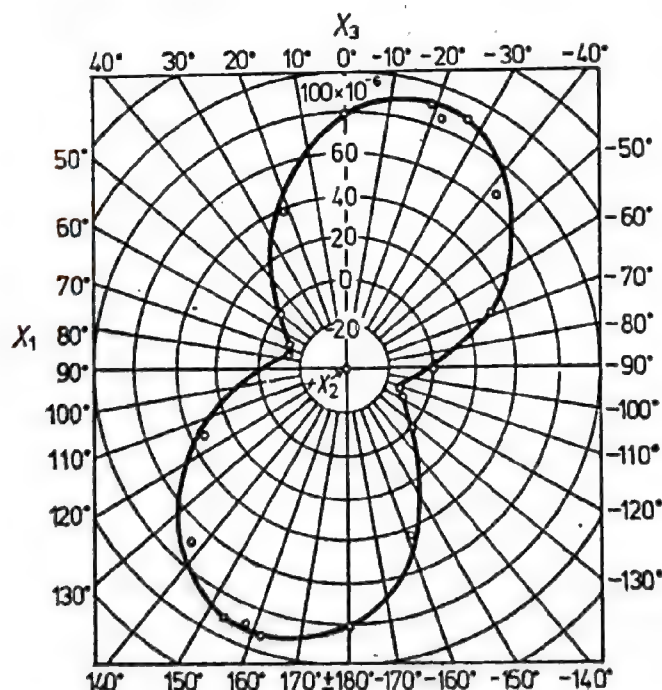


Fig. 52.1. Dilatarea termică a unui cristal de etilendiamintartrat, clasa 2, în planul X_1X_2 (aceasta nu este o secțiune a suprafeței) (Mason, 1952).

Din această cauză, suprafețele dilatării termice ale unor cristale, de exemplu, calcit, etilendiamintartrat (de comparat figurile 24.3 și 52.1) sînt alb-negre (în această figură și în următoarele

porțiunile pozitive „negre” și negative „albe” ale suprafețelor sînt însemnate respectiv cu semnele plus și minus), ceea ce nu s-a întîmplat niciodată în cazul suprafețelor tensorilor de material studiați mai înainte. Porțiunile negre ale unei suprafețe corespund acelor direcții din cristal, după care dimensiunile liniare în loc să crească odată cu creșterea temperaturii, ca de obicei, se micșorează. Conul direcțiilor în care dilatarea termică este egală cu zero este determinat din ecuația $\alpha_{ij} q_i q_j = 0$, în componentele vectorului unitar, q . De exemplu, în cazul calcitului, acest vector face un unghi de $64^\circ 43'$ cu axa principală de simetrie, X_3 . Geometria dilatării termice a cristalelor a fost studiată amănunțit de către A. V. Șubnikov (1956).

Forma generală a tensorilor coeficienților elasticității și deformabilității elastice, invariante la toate grupurile posibile cristalografice și limită, este dată în tabelul E 18. Faptul însă că forma generală a acestor tensori în unele clase este diferită, nu implică nicidecum că și simetria proprietăților elastice a cristalelor respective este tot diferită. Astfel, din tabelele E 18 și 47.1 se vede că numărul de invariante independente ai tensorului proprietăților elastice este același pentru ambele subsisteme ale sistemului tetragonal. Numărul diferit de componente cît și forma diferită a tensorilor din subsistemele superior și inferior se poate explica simplu prin faptul că direcțiile vectorilor bazei, e_1 și e_2 , din subsistemele inferioare ale categoriei medii nu sînt determinate de elementele de simetrie ale cristalului. De aceea, pentru subsistemul inferior vom introduce, pe lîngă baza cristalofizică, e_1, e_2, e_3 , baza

$$\begin{aligned} e'_1 &= e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi, \\ e'_2 &= -e_1 \sin \varphi + e_2 \cos \varphi, \\ e'_3 &= e_3, \end{aligned} \quad (52.1)$$

luînd unghiul φ astfel încît componenta s'_{16} a tensorului $s_{\lambda\mu}$ în această bază să fie egală cu zero

$$s'_{16} = P_{1'\lambda} P_{6'\mu} s_{\lambda\mu} = 0. \quad (52.2)$$

Substituind în ecuația (52.2) elementele matricei $P_{x'\lambda}$, care definește rotația în jurul axei X_3 (vezi formula (F.26)), și componentele tensorului pentru subsistemul inferior al sistemului tetragonal (v. tabelul E. 18), obținem

$$\operatorname{tg} 4\varphi = \frac{4s_{16}}{2(s_{11} - s_{12}) - s_{66}}. \quad (52.3)$$

Unghiul φ poate fi determinat din condiția ca componentele c'_{16} ale tensorului $c_{\lambda\mu}$ să fie zero. Astfel obținem

$$\operatorname{tg} 4\varphi = \frac{4c_{16}}{c_{11} - c_{12} - 2c_{66}}. \quad (52.4)$$

Așadar, în baza (52.1) în care unghiul φ este determinat din condiția (52.3) sau (52.4), tensorii s și c pentru un sistem inferior al sistemului tetragonal capătă aceeași formă pe care o au în baza cristalofizică acești tensori, pentru subsistemul superior al aceluiași sistem. De aici rezultă că toate cristalele sistemului tetragonal fac parte dintr-o singură clasă de simetrie elastică, $4/mmm$. Figurile 54.3 — 54.5 arată că suprafețele proprietăților elastice pentru cristalele ambelor subsisteme ale sistemului tetragonal au într-adevăr aceeași simetrie, $4/mmm$.

Ambele subsisteme ale sistemului tetragonal formează, de asemenea, o singură clasă de simetrie elastică, $3m$. Baza (52.1) pentru subsistemul inferior al sistemului trigonal se determină din condiția

$$\operatorname{tg} 3\varphi = \frac{s_{25}}{s_{14}} = \frac{c_{25}}{c_{14}}. \quad (52.5)$$

Cu toate că forma generală a tensorilor proprietăților elastice a fost stabilită încă din secolul al XIX-lea, faptul că clasele simetriei elastice $3m$ și $4/mmm$ coincid cu sistemele trigonal și tetragonal a fost observat relativ recent.

Ca orice alți tensori, și tensorii c și s pot fi descompuși (v., de exemplu, § 83), în părți ireductibile. Aceste părți ireductibile se exprimă prin tensori ireductibili, introduși în § 47 cu ajutorul tensorilor izotropi ai lui Kronecker și Levi-Civita. Vom efectua descompunerea tensorilor c și s în două etape. În prima etapă separăm din aceștia părțile $c^{(4)}$ și $s^{(4)}$, simetrice în raport cu toți indicii; părțile rămase, $c^{(22)}$ și $s^{(22)}$, care au simetria internă $[[V^2]^2]$, se anulează prin simetrizare în raport cu toți indicii. Așadar, prima etapă a dezvoltării este

$$s = s^{(4)} + s^{(22)}, \quad s_{ijkl}^{(4)} = s_{(ijk)l}, \quad s_{ijkl}^{(22)} = s_{ijll} - s_{(ijk)l} \quad (52.6)$$

(formulele pentru c sînt complet analoage). Utilizînd metodele teoriei și reprezentărilor grupurilor, se poate arăta că $s^{(4)}$ se descompune în trei părți — scalară, deviatoară și nonoară — iar $s^{(22)}$ în două părți — scalară și deviatoară. Simetria internă a tensorilor

$s^{\{4\}}$ și $s^{\{22\}}$ determină univoc (cu exactitate de pină la niște coeficienți numerici) forma descompunerilor din etapa a doua*

$$s_{ijkl}^{\{4\}} = I^{\{4\}} \delta_{(ij} \delta_{kl)} + D_{(ij}^{\{4\}} \delta_{kl)} + N_{ijkl}^{\{4\}}, \quad (52.7)$$

$$s_{ijkl}^{\{22\}} = I^{\{22\}} (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{(ij} \delta_{kl)}) + \left[\frac{1}{2} (D_{ij}^{\{22\}} \delta_{kl} + D_{kl}^{\{22\}} \delta_{ij}) - D_{(ij}^{\{22\}} \delta_{kl)} \right] \quad (52.8)$$

Contractând membrii din dreapta și din stînga ai acestor egalități, sînt ușor de găsit formulele ce exprimă tensorii ireductibili $I^{\{4\}}$, $D^{\{4\}}$, ..., $D^{\{22\}}$ prin tensorii $s^{\{4\}}$ și $s^{\{22\}}$

$$I^{\{4\}} = \frac{1}{5} s_{iikk}^{\{4\}}, \quad D_{ij}^{\{4\}} = \frac{2}{7} (3s_{ijkk}^{\{4\}} - 5I^{\{4\}} \delta_{ij}),$$

$$N_{ijkl}^{\{4\}} = s_{ijkl}^{\{4\}} - I^{\{4\}} \delta_{(ij} \delta_{kl)} - D_{(ij}^{\{4\}} \delta_{kl)},$$

$$I^{\{22\}} = \frac{1}{4} s_{iikk}^{\{22\}}, \quad D_{ij}^{\{22\}} = 3s_{ijkk}^{\{22\}} - 4I^{\{22\}} \delta_{ij}.$$

Pentru cristalele claselor pentru care deviatorii și nonorii ireductibili sînt multipli ai unității, adică

$$D_{ij}^{\{4\}} = S_D^{\{4\}} D_{ij}^{(0)}, \quad D_{ij}^{\{22\}} = S_D^{\{22\}} D_{ij}^{(0)} \quad \text{ș.a.m.d.}$$

(v. tabelul 47.4), aceste dezvoltări se simplifică substanțial, căpătînd forma

$$s_{ijkl} = S_I^{\{4\}} \delta_{(ij} \delta_{kl)} + S_D^{\{4\}} D_{(ij}^0 \delta_{kl)} + S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0 + S_I^{\{22\}} (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{(ij} \delta_{kl)}) + \\ + S_D^{\{22\}} \left[\frac{1}{2} (D_{ij}^0 \delta_{kl} + D_{kl}^0 \delta_{ij}) - D_{(ij}^0 \delta_{kl)} \right] = \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} + 2S_I^{\{22\}}) \delta_{ij} \delta_{kl} +$$

* Prima etapă constă în descompunerea tensorilor e și s în părți care se transformă după reprezentările ireductibile ale grupurilor tuturor transformărilor liniare posibile ale spațiului tridimensional $GL(3)$, $\{4\}$ și $\{22\}$, fiind notațiile reprezentărilor ireductibile corespunzătoare. În a doua etapă fiecare dintre ele se descompune în părți care se transformă după reprezentările ireductibile D_i ale grupului ortogonal $\infty\infty m$ sau $O(3)$ — ele se și numesc aici părți ireductibile. Amănunte asupra acestor probleme se pot vedea în Sirotin (1974); tot acolo sînt date formulele de descompunere în părți ireductibile și a celorlalți tensori de material.

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{3} (S_I^{(4)} - S_I^{(22)}) (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \frac{1}{6} (S_D^{(4)} + 2S_D^{(22)}) (D_{ij}^0 \delta_{kl} + \\
& + D_{kl}^0 \delta_{ij}) + \frac{1}{6} (S_D^{(4)} - S_D^{(22)}) (D_{ik}^0 \delta_{jl} + D_{jl}^0 \delta_{ik} + D_{il}^0 \delta_{jk} + \\
& + D_{jk}^0 \delta_{il}) + S_N^{(4)} N_{ijkl}^0.
\end{aligned} \quad (52.9)$$

Aici coeficienții $S_I^{(4)} \equiv I^{(4)}$ și $S_I^{(22)} \equiv I^{(22)}$ sînt introduși pentru uniformizarea scrierii. Dezvoltările (52.7) și (52.8) s-au contopit, dar cu ajutorul indicilor $\{4\}$ și $\{22\}$ ai coeficienților S se pot separa ușor.

Conform teoremei lui Hermann, cristalele din sistemul hexagonal sînt transversal izotrope în ce privește proprietățile lor elastice, formînd, împreună cu texturile, clasa de simetrie elastică ∞/mm . Toate direcțiile care fac cu axa principală de simetrie același unghi sînt asemănătoare din punct de vedere al proprietăților elastice, în ciuda faptului că, în cazul cristalelor hexagonale, aceste direcții sînt, desigur, cristalografic deosebite. Acesta este unul dintre numeroasele cazuri în care simetria unei proprietăți a cristalului este superioară simetriei cristalului însuși.

Pentru cristalele sistemului hexagonal și pentru texturi, deviatorii și nonorii sînt multipli ai unității, deviatorul unitar și, respectiv, nonorul unitar fiind definiți prin formulele

$$D_{ij}^0 = \frac{1}{2} (3 k_i k_j - \delta_{ij}), \quad (52.10)$$

$$N_{ijklm}^0 = \frac{1}{8} (35 k_i k_j k_l k_m - 30 k_{(i} k_j \delta_{lm}) + 3 \delta_{(ij} \delta_{lm})), \quad (52.11)$$

unde \mathbf{k} este vectorul unitar al axei principale de simetrie; în sistemul de coordonate cristalofizic $k_i = \delta_{i3}$, formulele (52.10) și (52.11) trecînd în formulele pentru $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$ și $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$ din tabelul 47.4. Pentru aceste cristale, coeficienții dezvoltării (52.9) sînt egali cu

$$S_I^{(4)} = \frac{1}{15} (8 s_{11} + 3 s_{33} + 4 s_{13} + 2 s_{44}),$$

$$S_I^{(22)} = \frac{1}{6} (-s_{11} + 3 s_{12} + 4 s_{13} - s_{44}),$$

$$S_D^{\{4\}} = \frac{2}{21} (-8 s_{11} + 6 s_{33} + 2 s_{13} + s_{44}), \quad (52.12)$$

$$S_D^{\{22\}} = \frac{1}{3} (2 s_{11} - 6 s_{12} + 4 s_{13} - s_{44}),$$

$$S_N^{\{4\}} = \frac{8}{35} (s_{11} + s_{33} - 2 s_{13} - s_{44}).$$

Tensorul c se descompune prin același procedeu. În formula (52.9) cînd este aplicată tensorului c , este firesc ca coeficienții să se scrie sub forma $C_I^{\{4\}}, \dots, C_D^{\{22\}}$. Acești coeficienți se calculează după formulele (52.12), în care, s_{11}, \dots, s_{13} sînt înlocuiți prin c_{11}, \dots, c_{13} , pe cînd în locul lui s_{44} urmează să se pună $4c_{44}$.

Dacă coeficienții $C_D^{\{4\}}$, $C_D^{\{22\}}$ și $C_N^{\{4\}}$ sau $S_D^{\{4\}}$, $S_D^{\{22\}}$ și $S_N^{\{4\}}$ ar fi egali cu zero, tensorul coeficienților de elasticitate și cel al coeficienților deformabilității elastice ar deveni tensori izotropi. De aici rezultă deci că aceste seturi de coeficienți caracterizează anizotropia corpurilor transversal-izotrope în ceea ce privește proprietățile elastice. Se poate verifica suficient de ușor că anularea tuturor coeficienților unuia dintre seturi implică și anularea tuturor coeficienților celuilalt set. Totodată, coeficienții $C_I^{\{22\}}$ și $C_D^{\{22\}}$ și, respectiv, $S_I^{\{22\}}$ și $S_D^{\{22\}}$, caracterizează antisimetria tensorilor c și s față de indici: dacă ei ar deveni egali cu zero, simetria internă a tensorilor c și s ar fi $[V^4]$.

Cristalele sistemului cubic se deosebesc de corpurile izotrope după simetria proprietăților elastice, constituind clasa de simetrie $m3m$. Nonorii lor sînt multipli ai unității, iar deviatorii sînt egali cu zero (vezi tabelul 47.1). Din această cauză, descompunerea (52.9) pentru cristalele cubice se mai simplifică încă, căpătînd forma

$$\begin{aligned} s_{ijkl} &= S_I^{\{4\}} \delta_{(ij} \delta_{kl)} + S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0 + S_I^{\{22\}} (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{(ij} \delta_{kl)}) = \\ &= \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} + 2S_I^{\{22\}}) \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) (\delta_{ik} \delta_{jl} + \\ &\quad + \delta_{il} \delta_{jk}) + S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0. \end{aligned} \quad (52.13)$$

Nonorul unitar al simetriei cubice (pe el urmează să-l notăm $N^0[m3m]$, pentru a se deosebi de $N^0[\infty/mm]$, introdus mai sus),

în concordanță cu § 47, are, într-un reper cristalofizic, componentele

$$N_{ijkl}^0 = \begin{cases} 1 & \text{pentru cei patru indici egali,} \\ -1/2 & \text{pentru două perechi de indici egali,} \\ 0 & \text{în celelalte cazuri.} \end{cases} \quad (52.14)$$

Coeficienții descompunerii (52.13) se calculează după formulele

$$S_I^{(4)} = \frac{1}{5} (3s_{11} + 2s_{12} + s_{44}),$$

$$S_I^{(22)} = s_{12} - \frac{1}{4} s_{44}, \quad (52.15)$$

$$S_N^{(4)} = \frac{1}{5} (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}).$$

Tensorul coeficienților elasticității se determină și ei tot cu formula (52.13), în care locul coeficienților S îl iau coeficienții C ; aceștia, la rîndul lor, se calculează după formulele (52.15), în care, în loc de s_{11} , s_{12} și s_{44} se pun, respectiv, c_{11} , c_{12} și $4c_{44}$.

Faptul că tensorii c și s sînt antisimetrice în raport cu indicii este caracterizat respectiv de coeficienții $C_I^{(22)}$ și $S_I^{(22)}$. Anizotropia elastică a cristalelor cubice este determinată de coeficienții $C_N^{(4)}$ și $S_N^{(4)}$, anularea unuia dintre ei implicînd și anularea celuilalt. Deoarece constantele elastice depind în mod substanțial de temperatură, și coeficienții anizotropiei elastice depind, de asemenea, de temperatură. Astfel, în cazul sării geme, pe măsură ce temperatura crește, anizotropia elastică se micșorează pînă la temperatura de 690 K, la care cristalul devine elastic izotrop, iar dacă temperatura crește în continuare, semnul anizotropiei (adică al coeficienților $C_N^{(4)}$ și $S_N^{(4)}$) se schimbă. Gradul de anizotropie elastică se evaluează prin raportul adimensional

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}}, \quad (52.16)$$

care exprimă dependența de direcție a rezistenței unui cristal cubic la o deformare de forfecare (de comparat cu tabelul 53.3).

În cazul corpurilor izotrope și girotrope tensorii coeficienților de elasticitate și de deformabilitate elastică sînt izotropi

$$s_{ijkl} = S_I^{\{4\}} \delta_{ij} \delta_{kl} + S_I^{\{22\}} (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{ik} \delta_{jl}) =$$

$$= \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} + 2S_I^{\{22\}}) \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk},$$
(52.17)

$$S_I^{\{4\}} = s_{11}, \quad S_I^{\{22\}} = \frac{1}{2} (s_{11} - 3s_{12});$$
(52.18)

formule analage sînt valabile pentru tensorul c . Pentru corpurile izotrope, din formula (51.11) rezultă relațiile

$$(c_{11} - c_{12}) (s_{11} - s_{12}) = (c_{11} + 2c_{12}) (s_{11} + 2s_{12}) = c_{44} s_{44} = 1$$
(52.19)

(formulele (52.19) sînt adevărate și pentru cristalele din sistemul cubic), iar din formula (52.16), relațiile

$$c_{11} - c_{12} = 2c_{44}, \quad 2(s_{11} - s_{12}) = s_{44}.$$
(52.20)

Pentru caracterizarea proprietăților elastice ale corpurilor izotrope, alături de coeficienții de elasticitate și de deformabilitate elastică se mai utilizează și modulul lui Young,

$$E = \frac{1}{s_{11}},$$

coeficientul lui Poisson,

$$\nu = - \frac{s_{12}}{s_{11}},$$

modulul de comprimare în volum,

$$K = \frac{1}{3} (c_{11} + 2c_{12}),$$

modulul de forfecare,

$$G = \frac{(c_{11} - c_{12})}{2} = \frac{1}{s_{44}},$$

și coeficienții lui Lamé,

$$\lambda = c_{12} \text{ și } \mu = G.$$

Doi coeficienți independenți caracterizează proprietățile elastice ale unui material izotrop.

Proprietățile elastice ale unor cristale sînt date în tabelele 52.1 și 52.2. În general, relativ la proprietățile elastice ale cristalelor poate fi consultată lucrarea lui Aleksandrov și Rîjov (1961).

Tabelul 52.1

Coefficienții de elasticitate, $c_{\lambda\mu}$ (în 10^{11} dyn/cm²), și de deformabilitate elastică, $s_{\lambda\mu}$ (în 10^{-13} cm²/dyn), pentru unele cristale

Sistemul cubic							
Cristalul	c_{11}	c_{12}	c_{44}	Cristalul	c_{11}	c_{12}	c_{44}
Diamant	107,6	12,5	57,6	LiF	11,12	4,20	6,28
Germaniu	12,89	4,83	6,71	NaCl	4,96	1,24	1,29
Siliciu	16,74	6,52	7,96	Ag	5,01	3,62	0,63
GaAs	11,88	5,38	5,94	Fier α	24,2	14,65	11,2
ZnS	10,79	7,22	4,12	Sodiu	0,603	0,459	0,586
KBr	3,45	0,54	0,51	Aluminiu	10,73	6,09	2,83
KI	2,71	0,45	0,36	Cupru	16,84	12,14	7,54
KCl	4,03	0,66	0,62	Wolfram	51,26	20,58	15,27

Sistemul hexagonal					
Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}
CdS	8,16	8,08	1,43	4,95	4,79
Gheață (−16 °C)	1,385	1,449	0,319	0,707	0,581
Cuarț β (600 °C)	11,66	11,04	3,61	1,67	3,28
Magneziu	5,05	5,87	1,68	2,32	1,81
Zinc	15,9	6,21	4,00	3,23	4,82

Sistemul tetragonal						
Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{66}	c_{12}	c_{13}
BaTiO ₃	27,51	16,49	5,43	11,31	17,90	15,16
KH ₂ PO ₄	7,16	5,64	1,25	0,62	−0,62	1,49
NH ₄ H ₂ PO ₄	6,88	3,40	0,86	0,60	0,41	2,04
Rutil	27,3	48,4	12,5	19,4	17,6	14,9

Sistemul trigonal						
Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}	c_{14}
Calcit	13,8	7,92	3,42	4,55	4,49	−2,07
Cuarț α	8,68	10,59	5,83	0,71	1,19	−1,81
Corindon	49,7	49,8	14,7	16,4	11,1	−2,4
Telur	3,59	7,64	3,41	0,90	2,75	1,37
Turmalină	27,2	16,5	6,5	4,0	3,5	−0,7

Tabelul 52.1 (continuare)

Sistemul rombic									
Cristalul	c_{11}	c_{22}	c_{33}	c_{44}	c_{55}	c_{66}	c_{12}	c_{13}	c_{23}
Aragonit	16,0	8,67	8,45	4,14	2,56	4,27	3,73	0,17	1,57
Sare Seignette	2,80	4,14	3,94	0,67	0,28	0,96	1,74	1,50	1,97
HIO ₃	2,99	5,39	4,35	1,84	2,19	1,74	1,11	1,15	0,51
Topaz	28,7	36,5	30,0	11,0	13,5	13,3	12,8	8,5	9,0
Uraniu α	21,5	19,9	26,7	12,4	7,3	7,4	4,6	2,2	10,8

Sistemul monoclinic								
Cristalul	c_{11}	c_{22}	c_{33}	c_{12}	c_{13}	c_{23}	c_{44}	
Sulfat triglicinic		4,55	3,21	2,63	1,72	1,98	2,08	0,95
Etilendiamintartrat		6,40	3,36	2,25	1,30	2,67	1,03	0,52

Cristalul	c_{65}	c_{66}	c_{15}	c_{25}	c_{35}	c_{46}
Sulfat triglicinic	1,11	0,62	-0,30	-0,036	-0,5	-0,026
Etilendiamintartrat	1,16	0,52	1,31	-0,008	0,73	-0,01

Sistemul cubic							
Cristalul	s_{11}	s_{12}	s_{44}	Cristalul	s_{11}	s_{12}	s_{44}
Diamant	0,95	-0,1	1,74	NaCl	22,9	-4,6	79,4
GaAs	11,72	-3,65	16,83	NaClO ₃	23,35	-5,15	85,4
ZnS	18,39	-7,07	21,69	Aluminu	15,7	-5,7	35,1
KCl	26,2	-3,5	160,0	Sodiu	6,03	-4,59	5,86
LiF	11,35	-3,1	15,9	Cupru	14,98	-6,29	13,26

Sistemul hexagonal					
Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}
Cuarț α	9,26	10,85	-0,80	-2,52	27,89
CdS	20,69	16,97	-9,99	-5,81	66,49

Sistemul trigonal						
Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}	s_{14}
Cuarț α	12,79	9,56	-1,54	-1,10	19,78	4,46
Telur	56,1	23,8	-13,6	-14,4	52,9	26,9
Turmalină	3,98	6,24	-1,03	-0,16	15,12	0,58

Tabelul 52.1 (continuare)

Sistemul tetragonal

Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}	s_{66}	s_{16}
BaTiO ₃	8,05	15,7	-2,35	-5,24	18,4	8,84	
NH ₄ H ₂ PO ₄	18,1	43,5	1,9	-11,8	115,3	164,6	
KH ₂ PO ₄	15,3	19,6	2,0	-3,8	77,5	168,0	
AgClO ₃	35,7	40,0	-15,6	-12,9	152,0	114,0	9,4
GaMoO ₄	9,74	9,58	-3,80	-2,30	27,2	24,7	4,33
Pentaeritrit	199,9	127,2	82,2	-17,7	285,7	219,1	9,94

Sistemul rombic

Cristalul	s_{11}	s_{22}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{23}	s_{44}	s_{55}	s_{66}
HIO ₃	39,8	20,1	25,6	-7,75	-9,7	-0,45	54,5	45,6	57,6
KB ₅ O ₈ ·4H ₂ O	23,2	73,6	98,3	-10,6	-6,1	-60,0	64,0	215,0	175,0
Rezorcină	190,0	106,0	150,0	-40,0	-34,0	-88,0	307,0	230,0	250,0

Sistemul monoclinic

Cristalul	s_{11}	s_{22}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{23}	s_{44}
Li ₂ SO ₄ ·H ₂ O		26,2	22,5	23,9	-7,0	-9,8	-3,0
Sulfat triglicinic		34,0	66,0	93,2	-3,4	-22,4	-48,2
Etilendiamintartrat		33,4	36,5	100,2	-3,0	-32,8	-18,0

Cristalul	s_{55}	s_{66}	s_{15}	s_{25}	s_{35}	s_{46}
Li ₂ SO ₄ ·H ₂ O	50,6	69,0	4,0	-7,3	-0,5	-8,8
Sulfat triglicinic	92,0	161,4	7,9	-0,9	-3,4	4,4
Etilendiamintartrat	122,0	191,4	-17,0	15,0	-26,5	3,8

Tabelul 52.2

Coefficienții de elasticitate $c_{\lambda\mu}$ (în 10^{10} N/m²), ai cristalului triclinic de sulfat de cupru, CuSO₄·5H₂O (Krishnan, Radha, Gopal, 1971)

λ	μ					
	1	2	3	4	5	6
1	5,65	2,65	3,21	-0,33	-0,08	-0,39
2	2,65	4,33	3,47	-0,07	-0,21	0,20
3	3,21	3,47	5,69	-0,44	-0,21	-0,16
4	-0,33	-0,07	-0,44	1,73	0,09	0,03
5	-0,08	-0,21	-0,21	0,09	1,22	-0,26
6	-0,39	0,20	-0,16	0,03	-0,26	1,00

§ 53. STĂRILE TENSIONATE SIMPLE

Vom considera stări tensionate simple acele stări tensionate pentru care tensorul tensiunilor, σ , depinde liniar de coordonatele carteziane

$$\sigma = \mathbf{A} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{r}, \quad \sigma_{ij} = A_{ij} + B_{ijk}x_k, \quad (53.1)$$

unde \mathbf{A} și \mathbf{B} sînt tensori care nu depind de coordonate: \mathbf{A} este un tensor simetric de rangul doi, iar \mathbf{B} , un tensor de rangul trei, simetric în raport cu primii doi indici. Este adevărată următoarea teoremă.

Teorema stărilor tensionate simple. Dacă într-un corp izotrop, sub acțiunea unor forțe aplicate la suprafața sa, apare o anumită stare tensionată simplă, atunci, într-un corp anizotrop omogen, de aceeași formă, sub acțiunea acelorași forțe va apărea exact aceeași stare de tensiune.

Demonstrația se bazează pe teorema asupra unicității soluțiilor ecuațiilor din teoria elasticității. Într-adevăr, în ecuațiile Beltrami-Mitchell intră numai derivatele de ordinul doi ale tensorului tensiunilor, care, în cazul unei stări tensionate simple, sînt toate nule, astfel încît toate aceste ecuații sînt identic satisfăcute. În ecuațiile echilibrului elastic ale lui Cauchy, în general, nu intră nici un fel de caracteristici de material, astfel încît la înlocuirea unui corp cu altul (de aceeași formă și în aceleași condiții la limită) aceste ecuații nu se schimbă. Așadar, una și aceeași stare tensionată simplă este soluția ecuațiilor în tensiuni ale teoriei elasticității pentru orice corpuri elastice omogene pe care ni le putem imagina (acest fapt este extrem de important!). În virtutea teoremei unicității, pentru nici unul dintre aceste corpuri nu poate exista nici o altă soluție, diferită.

În acest paragraf și în următoarele vor fi studiate unele exemple practice importante ale aplicării teoremei demonstrate.

Vom începe cu cazurile în care cîmpul tensiunilor este omogen, adică tensorul tensiunilor nu depinde de coordonate. Ecuațiile lui Cauchy sînt în acest caz satisfăcute identic, deci este suficient să se verifice doar dacă sînt satisfăcute și condițiile la limită.

Comprimarea exercitată din toate direcțiile. Dacă asupra unui corp elastic acționează presiunea hidrostatică p , condițiile la limită sînt următoarele

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = -p\mathbf{n}, \quad \sigma_{ij}n_j = -pn_i, \quad (53.2)$$



n fiind vectorul unitar al normalei exterioare. Aceste condiții sînt satisfăcute de condiția evidentă

$$\sigma = -p\mathbf{I}, \quad \sigma_{ij} = -p\delta_{ij}. \quad (53.3)$$

Prin urmare, starea tensionată nu depinde absolut deloc de caracteristicile elastice ale corpului. Deformarea însă,

$$\varepsilon = -ps : \mathbf{I}, \quad \varepsilon_{ij} = -ps_{ijkl} \quad (53.4)$$

depinde substanțial de ele. Tensorul simetric de rangul doi, $S_{ij} = s_{ijkl}$, se numește *tensorul coeficienților de compresibilitate*. Cu ajutorul lui, deformarea provocată de acțiunea presiunii hidrostatice se scrie sub forma

$$\varepsilon_{ij} = -S_{ij}p, \quad \varepsilon_\lambda = -S_\lambda p. \quad (53.5)$$

Formulele care exprimă componentele S_{ij} ale tensorului S prin coeficienții deformabilității elastice, $s_{\lambda\mu}$, pentru toate clasele cristalografice, sînt date în tabelul 53.1. Din tabel se vede, între altele, că efectul simetriei cristalelor asupra deformării lor, în cazul comprimării hidrostatice, este exact același ca și asupra

Tabelul 53.1

Tensorul $S_{ij} = s_{ijkl}$ pentru toate clasele cristalografice și clasele limită

Sistemele	Tensorul $S_{ij} = s_{ijkl}$		
Sistemul triclinic	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$ $\frac{1}{2}(s_{16} + s_{25} + s_{36})$ $\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$ $s_{22} + s_{12} + s_{23}$ $\frac{1}{2}(s_{14} + s_{24} + s_{34})$	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$ $\frac{1}{2}(s_{14} + s_{24} + s_{34})$ $s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemul monoclinic 2 X_2	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$ 0 $\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$	0 $s_{22} + s_{12} + s_{23}$ 0	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$ 0 $s_{33} + s_{23} + s_{31}$
2 X_3	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$ $\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$ 0	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$ $s_{22} + s_{12} + s_{23}$ 0	0 0 $s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemul rombic	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$ 0 0	0 $s_{22} + s_{12} + s_{23}$ 0	0 0 $s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemele trigonal, tetragonal, hexagonal și texturile	$s_{11} + s_{12} + s_{13}$ 0 0	0 $s_{11} + s_{12} + s_{13}$ 0	0 0 $s_{33} + 2s_{13}$
Sistemul cubic și corpurile izotrope	$s_{11} + 2s_{12}$ 0 0	0 $s_{11} + 2s_{12}$ 0	0 0 $s_{11} + 2s_{12}$

celorlalte proprietăți ale lor, care se exprimă prin tensori simetrici de rangul doi (proprietățile dielectrice, dilatarea termică etc.).

Variația relativă a volumului, sub acțiunea presiunii hidrostatice,

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{ii} = -S_{ii}p,$$

este caracterizată de scalarul $K^{-1} = S_{ii} = S_{iikk}$ — *coeficientul de întindere în toate direcțiile*. Mărimea K , inversa mărimii S_{ii} , se numește *modulul de întindere în toate direcțiile*. Variația formei corpurilor elastice anizotrope sub acțiunea presiunii hidrostatice se caracterizează prin deviatorul deformațiilor, $e_{ij} = -R_{ij}p$, care este proporțional cu deviatorul tensorului coeficienților compresibilității

$$R_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3} K^{-1} \delta_{ij}. \quad (53.6)$$

Întinderea după o singură direcție. Să examinăm o bară cilindrică a cărei secțiune, de arie S , este arbitrară, și la capetele căreia se aplică forțele de întindere $S\sigma$, distribuite uniform pe suprafața capetelor; suprafața laterală a barei este liberă de sarcini. Să notăm cu q vectorul unitar îndreptat de-a lungul axei barei. Tensorul tensiunilor,

$$\sigma = \sigma qq, \quad \sigma_{ij} = \sigma q_i q_j, \quad (53.7)$$

satisface, evident, condițiile la limită. De aici, conform legii Hooke, determinăm deformarea

$$\varepsilon = \sigma s : qq, \quad \varepsilon_{ij} = \sigma s_{ijkl} q_k q_l. \quad (53.8)$$

Alungirea relativă a barei este

$$\frac{\Delta l}{l} = \varepsilon_{ij} q_i q_j = \sigma s_{ijkl} q_i q_j q_k q_l.$$

Raportul dintre alungirea relativă și tensiunea σ este mărimea inversă *modulului lui Young*, E , pentru direcția q ,

$$E^{-1}(q) = s_{ijkl} q_i q_j q_k q_l = qq : s : qq. \quad (53.9)$$

Calculul modului lui Young poate fi simplificat introducând notația

$$q_i q_j = (qq)_\lambda$$

unde

$$ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6,$$

atunci componentele tensiunii vor căpăta forma

$$\sigma_\mu = \sigma (qq)_\mu$$

cele ale deformării, forma

$$\varepsilon_\lambda = \sigma s_{\lambda\mu} (qq)_\mu$$

și, în fine, mărimea inversă modului lui Young, forma

$$E^{-1}(q) = s_{\lambda\mu} (qq)_\lambda (qq)_\mu. \quad (53.10)$$

Această formulă este mai comodă decât (53.9) atît prin faptul că cuprinde un număr de termeni considerabil mai mic, cît și prin faptul că valorile $s_{\lambda\mu}$ se iau direct din tabele.

Formulele de calculare a modului lui Young sînt reunite în tabelul 53.2.

Tabelul 53.2

Mărimea inversă a modului lui Young, $E^{-1}(q) = E_{[hkl]}^{-1}$, exprimată prin componentele q_i ale vectorului unitar, q , și prin indicii Miller ai direcției cristalografice

Formulele generale

$$E^{-1} = s_{\lambda\mu} Q_\lambda Q_\mu, \text{ unde } Q_\lambda = q_i q_j = \frac{A_{\alpha i} A_{\beta j} h^\alpha h^\beta}{g_{\gamma\eta} h^\gamma h^\eta} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6).$$

Sistemul triclinic

$$\begin{aligned} E^{-1} = & s_{11} Q_1^2 + s_{22} Q_2^2 + s_{33} Q_3^2 + (s_{44} + 2s_{23}) Q_2 Q_3 + \\ & + (s_{55} + 2s_{31}) Q_3 Q_1 + (s_{66} + 2s_{12}) Q_1 Q_2 + 2(s_{14} + s_{56}) Q_1 Q_4 + \\ & + 2(s_{25} + s_{64}) Q_2 Q_5 + 2(s_{36} + s_{45}) Q_3 Q_6 + 2s_{15} Q_1 Q_5 + \\ & + 2s_{16} Q_1 Q_6 + 2s_{26} Q_2 Q_6 + 2s_{24} Q_2 Q_4 + 2s_{34} Q_3 Q_4 + 2s_{35} Q_3 Q_5. \end{aligned}$$

În care :

$$Q_1 = q_1^2 = (ha \sin \beta - kb \sin \alpha \cos \gamma^*)^2 / g,$$

$$Q_2 = q_2^2 = (k/b^*)^2 / g,$$

$$Q_3 = q_3^2 = (ha \cos \beta + kb \cos \alpha + lc)^2 / g,$$

$$Q_4 = q_2 q_3 = (k/b^*) (ha \cos \beta + kb \cos \alpha + lc) / g,$$

$$Q_5 = q_3 q_1 = (ha \cos \beta + kb \cos \alpha + lc) (ha \sin \beta - kb \sin \alpha \cos \gamma^*) / g,$$

$$Q_6 = q_1 q_2 = (k/b^*) (ha \sin \beta - kb \sin \alpha \cos \gamma^*) / g,$$

$$g = h^2 a^2 + k^2 b^2 + l^2 c^2 + 2klbc \cos \alpha + 2lhca \cos \beta + 2hkab \cos \gamma.$$

Sistemul monoclinic ($2 \parallel X_2, m \perp X_2$)

$$E^{-1} = s_{11}Q_1^2 + s_{22}Q_2^2 + s_{33}Q_3^2 + (s_{44} + 2s_{23})Q_2Q_3 + (s_{55} + 2s_{31})Q_3Q_1 + \\ + (s_{66} + 2s_{12})Q_1Q_2 + 2(s_{25} + s_{64})Q_2Q_5 + 2s_{15}Q_1Q_5 + 2s_{35}Q_3Q_5,$$

în care :

$$Q_1 = q_1^2 = (ha \sin \beta)^2/g, \quad Q_3 = q_3^2 = (ha \cos \beta + lc)^2/g, \\ Q_2 = q_2^2 = (kb)^2/g, \quad Q_5 = q_3q_1 = ha \sin \beta (ha \cos \beta + lc)/g, \\ g = h^2a^2 + k^2b^2 + l^2c^2 + 2lhca \cos \beta.$$

Sistemul rhombic

$$E^{-1} = s_{11}q_1^4 + s_{22}q_2^4 + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{23})q_2^2q_3^2 + \\ + (s_{55} + 2s_{31})q_3^2q_1^2 + (s_{66} + 2s_{12})q_1^2q_2^2 = \\ = [h^4a^4s_{11} + k^4b^4s_{22} + l^4c^4s_{33} + k^2l^2b^2c^2(s_{44} + 2s_{23}) + l^2h^2c^2a^2(s_{55} + 2s_{31}) + \\ + h^2k^2a^2b^2(s_{66} + 2s_{12})]/(h^2a^2 + k^2b^2 + l^2c^2)^2.$$

Sistemul tetragonal

$$E^{-1} = s_{11}(q_1^4 + q_2^4) + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{13})(q_1^2 + q_2^2)q_3^2 + \\ + (s_{66} + 2s_{12})q_1^2q_2^2 + 2s_{16}q_1q_2(q_1^2 - q_2^2) = \\ = \{a^4[(h^4 + k^4)s_{11} + h^2k^2(s_{66} + 2s_{12}) + 2hk(h^2 - k^2)s_{16}] + \\ + l^4c^4s_{33} + (h^2 + k^2)l^2a^2c^2(s_{44} + 2s_{13})\}/[(h^2 + k^2)a^2 + l^2c^2]^2;$$

în clasele $4, \bar{4}, 4/m$ toți coeficienții $s_{\lambda\mu}$ sint diferiți de zero, în clasele $422, 4mm, 4/mmm$ coeficientul $s_{16} = 0$.

*Sistemele trigonal și hexagonal
(în structură hexagonală) și texturile*

$$E^{-1} = s_{11}(1 - q_3^2)^2 + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{13})q_3^2(1 - q_3^2) + \\ + 2s_{14}(3q_1^2 - q_2^2)q_2q_3 + 2s_{25}(3q_2^2 - q_1^2)q_1q_3 = \\ = \{(h^2 + k^2 - hk)^2a^4s_{11} + l^4c^4s_{33} + (h^2 + k^2 - hk)l^2a^2c^2(s_{44} + 2s_{13}) + \\ + a^3c[3\sqrt{3}hkl(h - k)s_{14} + l(2h - k)(2k^2 - h^2 + hk)s_{25}]\} : \\ : [(h^2 + k^2 - hk)a^2 + l^2c^2]^2;$$

în clasele $3, \bar{3}$ toate componentele $s_{\lambda\mu}$ sint diferite de zero, în clasele $32, 3m, \bar{3}m$ coeficientul $s_{25} = 0$,

în sistemul hexagonal și în texturi coeficienții $s_{14} = s_{25} = 0$.

Sistemul cubic

$$E^{-1} = s_{11} - (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44})(q_2^2q_3^2 + q_3^2q_1^2 + q_1^2q_2^2) = \\ = s_{11} - (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44})(k^2l^2 + l^2h^2 + h^2k^2)/(h^2 + k^2 + l^2)^2.$$

Corpurile izotrope

$$E^{-1} = s_{11}.$$

Notatii: $s_{\lambda\mu}$ - coeficienții deformabilității elastice, a, b, c, α, β - parametrii rețelei cristaline, b^*, γ^* - parametrii rețelei reciproce, $A_{\alpha\beta}, g_{\gamma\eta}$ - v. anexa B.

Variația relativă a grosimii barei, mai exact, dimensiunile ei liniare în direcția \mathbf{m} , perpendiculară pe direcția de întindere, este egală cu

$$\frac{\Delta l(\mathbf{m})}{l(\mathbf{m})} = \varepsilon_{ij} m_i m_j.$$

Să exprimăm deformarea prin tensiune; atunci

$$\frac{\Delta l(\mathbf{m})}{l(\mathbf{m})} = \sigma s_{ijkl} m_i m_j q_k q_l.$$

Raportul dintre variația grosimii barei și variația lungimii ei, luat cu semn schimbat, se numește, în teoria elasticității corpurilor izotrope, coeficientul lui Poisson, ν . Dacă extindem această noțiune asupra corpurilor anizotrope, coeficientul lui Poisson va fi o funcție de două direcții ortogonale, \mathbf{q} și \mathbf{m}

$$\begin{aligned} \nu(\mathbf{q}, \mathbf{m}) &= - \frac{\Delta l(\mathbf{m})/l(\mathbf{m})}{\Delta l(\mathbf{q})/l(\mathbf{q})} = \frac{s_{ijkl} m_i m_j q_k q_l}{s_{npqr} q_n q_p q_r q_q} = \\ &= - \frac{\mathbf{m} \mathbf{m} : \mathbf{s} : \mathbf{q} \mathbf{q}}{\mathbf{q} \mathbf{q} : \mathbf{s} : \mathbf{q} \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (53.11)$$

O variantă mai adecvată pentru calcule este următoarea formă de scriere a relației

$$\nu(\mathbf{q}, \mathbf{m}) = - \frac{s_{\lambda\mu}(\mathbf{m} \mathbf{m})_{\lambda} (\mathbf{q} \mathbf{q})_{\mu}}{s_{\rho\sigma}(\mathbf{q} \mathbf{q})_{\rho} (\mathbf{q} \mathbf{q})_{\sigma}}. \quad (53.12)$$

Coeficientul Poisson al unui mediu elastic anizotrop poate fi definit și astfel încât el să depindă nu de doi vectori unitari, ci numai de unul, dacă l-am fi interpretat drept o caracteristică a variației ariilor în planurile perpendiculare pe direcția de întindere

$$\nu = - \frac{\Delta S(\mathbf{q})/S(\mathbf{q})}{2 \Delta l(\mathbf{q})/l(\mathbf{q})}. \quad (53.13)$$

Deoarece

$$\frac{\Delta S(\mathbf{q})}{S(\mathbf{q})} = \varepsilon : (\mathbf{I} - \mathbf{q} \mathbf{q}) = \varepsilon_{ij} (\delta_{ij} - q_i q_j),$$

iar deformările se vor calcula după formula (53.8),

$$\nu(\mathbf{q}) = - \frac{\mathbf{q}\mathbf{q} : \mathbf{s} : (\mathbf{I} - \mathbf{q}\mathbf{q})}{2 \mathbf{q}\mathbf{q} : \mathbf{s} : \mathbf{q}\mathbf{q}} = \frac{s_{ijkl} q_i q_j (\delta_{kl} - q_k q_l)}{2 s_{nprt} q_n q_p q_r q_t}. \quad (53.14)$$

Observînd că $(\mathbf{q}\mathbf{q} : \mathbf{s} : \mathbf{q}\mathbf{q})^{-1}$ este modulul lui Young, $E(\mathbf{q})$, iar $\mathbf{q}\mathbf{q} : \mathbf{s} : \mathbf{I} = \mathbf{q} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q}$ este componenta normală a tensorului coeficienților de compresibilitate, \mathbf{S} , în direcția \mathbf{q} , obținem

$$\nu(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} [1 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q} E(\mathbf{q})]. \quad (53.15)$$

În cazul întinderii după o singură direcție, volumul barei variază (de obicei, se mărește). Variația relativă a volumului, $\Delta V/V = \varepsilon_{ii}$, este egală, în acest caz, cu

$$\frac{\Delta V}{V} = \sigma S_{ii} q_i q_i = \sigma \mathbf{q} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{q}, \quad (53.16)$$

unde \mathbf{S} este tensorul coeficienților de compresibilitate. Comparînd acest rezultat cu formula (53.15) pentru coeficientul Poisson, $\nu(\mathbf{q})$, vedem că formula cunoscută,

$$\frac{\Delta V}{V} = (1 - 2\nu) \sigma / E$$

care definește variația relativă a volumului în cazul unei întinderi într-o singură direcție a corpurilor izotrope, sub forma

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{1 - 2\nu(\mathbf{q})}{E(\mathbf{q})} \sigma \quad (53.17)$$

este valabilă și pentru corpurile anizotrope.

Pe baza exemplului coeficienților lui Poisson, $\nu(\mathbf{q}, \mathbf{m})$ și $\nu(\mathbf{q})$, ne-am convins o dată în plus că una și aceeași mărime, care definește o anumită proprietate a corpului izotrop, poate fi generalizată prin diferite procedee și pentru corpurile anizotrope, alegerea uneia sau alteia dintre generalizări depinzînd numai de proprietatea corpului anizotrop pe care anume vrem să-l definim.

Forfecarea. Să presupunem că pe fețele laterale ale unei bare paralelipedice sînt aplicate forțe uniform distribuite, tangente

la fețe; sub acțiunea acestui sistem de forțe, bara se află în echilibru. Pe unitatea de suprafață se exercită forța σ . Capetele sînt libere de sarcini. În acest caz, tensiunile din bară se numesc *tensiuni de forfecare*; ele sînt egale cu

$$\sigma = \sigma(pq + qp), \quad \sigma_{ij} = \sigma(p_i q_j + q_i p_j) \quad (53.18)$$

(p și q fiind vectori unitari ai normalelor la fețele laterale). Deformarea poate fi reprezentată sub forma

$$\varepsilon = 2\sigma s : pq, \quad \varepsilon_{ij} = 2\sigma s_{ijkl} p_k q_l \quad (53.19)$$

(folosind caracterul simetric al tensorului s în raport cu ultimii doi indici). Un interes deosebit îl prezintă componenta de forfecare a tensorului de deformare,

$$p \cdot \varepsilon \cdot q = 2\sigma pq : s : pq = 2\sigma s_{ijkl} p_i q_j p_k q_l.$$

Raportul dintre forța care se exercită asupra unității de arie a suprafeței și dublul componentei de forfecare a tensorului de deformare se numește *modul de forfecare*, $G(p, q)$, pentru perechea de direcții ortogonale, p și q . Modulul de forfecare este dat de formula

$$G^{-1}(p, q) = 4pq : s : pq = 4s_{ijkl} p_i q_j p_k q_l. \quad (53.20)$$

O formulă mai comodă pentru calcule este

$$G^{-1}(p, q) = \varepsilon_{\lambda\mu} (pq + qp)_\lambda (pq + qp)_\mu, \quad (53.21)$$

unde

$$(pq + qp)_\lambda = p_i q_j + q_i p_j \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6).$$

Pentru deducerea acestei formule, vezi anexa F.

Formulele (53.20) și (53.21) arată că modulul de forfecare, $G(p, q)$, este simetric în raport cu direcțiile p și q

$$G(p, q) = G(q, p). \quad (53.22)$$

În ciuda faptului că realizarea experimentală a unei distribuții a forțelor tangențiale asupra unei suprafețe, cu o precizie oricît de modestă, este foarte dificilă, totuși modulul de forfecare, definit de formula (53.22) joacă un rol deosebit de important în teoria dislocațiilor. Anume, dacă n este vectorul unitar al normalei la

Modulul de forfecare, $G(n, l)$, pentru sistemele de alunecare ale unor cristale

Sistemul de alunecare	Mărimea inversă modulului de forfecare $G^{-1}(n, l)$	Cristalele
<i>Sistemul triclinic</i>		
$(100) [001]$	$s_{44}^{-1} \cos^2 \gamma^* + s_{55}^{-1} \sin^2 \gamma^* + 2s_{45} \sin \gamma^* \cos \gamma^*$	disten
<i>Sistemul monoclinic</i>		
$(010) [001]$	s_{44}	ghips
<i>Sistemul rombic</i>		
$(010) [100]$ $(010) [001]$	s_{66} s_{44}	aragonit (CaCO_3) antimonit
<i>Sistemul trigonal, clasele $32, 3m, \bar{3}m$</i>		
$(111) [01\bar{1}] = (0001) [\bar{1}2\bar{1}0]$	s_{44}	Bi, calcit
$(100) [01\bar{1}] = (10\bar{1}1) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$\frac{8c^2 (s_{11} - s_{12}) + 3a^2 s_{44} - 8ac \sqrt{3} s_{14}}{3a^2 + 4c^2}$	calcit (CaCO_3)
<i>Sistemul tetragonal, clasele $422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$</i>		
$(100) [001]$	s_{44}	β -Sn
$(110) [011]$	s_{44}	β -Sn
$(1\bar{1}0) [111]$	$\frac{4a^2 (s_{11} - s_{12}) + c^2 s_{44}}{2a^2 + c^2}$	β -Sn, $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$
$(101) [00\bar{1}]$	$\frac{4a^2 c^2 (s_{11} + s_{33} - 2s_{13}) + (a^2 - c^2) s_{44}}{(a^2 + c^2)^2}$	β -Sn
$(11\bar{2}) [111]$	$\frac{2a^2 c^2 (2s_{11} + 4s_{33} + s_{66} + 2s_{12} - 8s_{13}) + (2a^2 - c^2) s_{44}}{(2a^2 + c^2)^2}$	$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$
$(121) [10\bar{1}]$	$\frac{4a^2 c^2 (s_{11} + s_{33} + s_{66} - 2s_{13}) + (a^2 + 5c^2 - 2a^2 c^2) s_{44}}{(a^2 + c^2) (a^2 + 5c^2)}$	β -Sn

Sistemul de alunecare	Mărimea inversă modulului de forfecare $G^{-1}(n, l)$	Cristalele
<i>Sistemul hexagonal</i>		
(0001) [11 $\bar{2}$ 0]	s_{44}	Zn, Cd, Mg, Ti, Be, Co
(01 $\bar{1}$ 0) [2110]	$2(s_{11} - s_{12})$	Zn, Cd, Mg, Ti, Be
(0 $\bar{1}$ 11) [2 $\bar{1}$ 10]	$\frac{8c^2(s_{11} - s_{12}) + 3a^2s_{44}}{3a^2 + 4c^2}$	Ti
(1 $\bar{2}$ 12) [10 $\bar{1}$ 0]	$\frac{2c^2(s_{11} - s_{12}) + a^2s_{44}}{a^2 + c^2}$	Mg
($\bar{1}$ 122) [11 $\bar{2}$ 3]	$\frac{4a^2c^2(s_{11} + s_{33} - 2s_{13}) + (a^2 - c^2)^2 s_{44}}{(a^2 + c^2)^2}$	Zn, Cd, Co
<i>Sistemul cubic</i>		
(001) [100]	s_{44}	TiBr-TiI
(001) [110]	s_{44}	Al
(110) [001]	s_{44}	NH ₄ Cl, NH ₄ Br, PbS, PbTe, AuZn,
(110) [1 $\bar{1}$ 0]	$2(s_{11} - s_{12})$	TiCl-TiBr, TiBr-TiI
(1 $\bar{1}$ 0) [111]	$\frac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \frac{1}{3}s_{44}$	NaCl, KCl, KBr, KI, AgCl, LiF
(111) [1 $\bar{1}$ 0]	$\frac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \frac{1}{3}s_{44}$	α -Fe, Mo, Nb, β -CuZn
(11 $\bar{2}$) [111]	$\frac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \frac{1}{3}s_{44}$	Ge, Ag, Au, Ni, Cu, CuAu, AlCu,
(12 $\bar{3}$) [111]	$\frac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \frac{1}{3}s_{44}$	AlZn, α -CuZn
		α -Fe
		α -Fe, AgMg

Notațiile: a, c — parametrii rețelei, γ^* — unghiul dintre vectorii bazei rețelei reciproce

planul de alunecare, iar l este vectorul unitar al direcției de alunecare, atunci pentru dislocațiile care acționează în sistemul de alunecare dat, cea mai importantă caracteristică a proprietăților elastice ale cristalului o va reprezenta tocmai modulul de forfecare, $G(n, l)$.

Dacă elementele de alunecare — planul și direcția — sînt date cu ajutorul indicilor Miller, $(n_1 n_2 n_3)$ și $[l^1 l^2 l^3]$, mărimea inversă modulului de forfecare poate fi calculată după formula

$$G^{-1}(n, l) = \frac{s_{ijkl} E_i^\alpha E_k^\beta A_{\gamma j} A_{\delta m} n_\alpha n_\beta l^\gamma l^\delta}{g^{\epsilon\zeta} n_\epsilon n_\zeta q_{\eta\zeta} l^\eta l^\zeta}, \quad (53.23)$$

în care E_i^α și $A_{\gamma j}$ sînt elementele matricelor care leagă versorii sistemului de coordonate cristalofizic de vectorii bazei rețelei cristaline (vezi § 16 și anexa B). Rezultatele unor astfel de calcule, pentru o serie de cristale, sînt date în tabelul 53.3.

Spre deosebire de corpurile izotrope, corpurile anizotrope, sub acțiunea tensiunilor de forfecare suferă o dilatare în volum (sau o contracție). Ea este egală cu

$$\frac{\Delta V}{V} = \epsilon_{ii} = 2\sigma s_{ijkl} p_k q_l = 2\sigma S_{kl} p_k q_l,$$

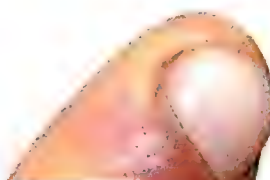
unde S este tensorul coeficienților de compresibilitate. Deoarece vectorii p și q sînt ortogonali, $\delta_{kl} p_k q_l = 0$; de aici rezultă că dilatarea în volum, sub acțiunea tensiunilor de forfecare este determinată de deviatorul tensorului de întindere în toate direcțiile,

$$\frac{\Delta V}{V} = 2\sigma R_{kl} p_k q_l. \quad (53.24)$$

§ 54. ÎNCOVOIEREA ȘI TORSIONAREA CRISTALELOR

În paragraful precedent au fost studiate stările de tensionare simple, pentru care tensorul tensiunilor nu depinde de coordonatele carteziene; în acest paragraf se vor examina cîteva stări de tensionare simple, caracterizate printr-o dependență liniară de coordonate.

Încovoierea unei bare cristaline paralelipipedice. Să examinăm o bară cristalină paralelipipedică de lungime $2c$, lățime $2a$ și grosime $2b$, la ale cărei capete sînt aplicate momentele de încovoiere M și, respectiv, $-M$. Vom atașa barei un sistem de coordonate



cartezian, care este, în general, necristalofizic, $OX'_1X'_2X'_3$, așa cum se arată în figura 54.1. Vom nota versorii e'_1 , e'_2 și e'_3 ai acestui reper cu m , n și q . Momentele de încovoiere, M și $-M$, pot fi create, în particular (aici se utilizează *principiul Saint-Venant*; vezi Leibenzon, 1947, § 49) de un sistem de sarcini, reprezentat schematic în figura 54.1: capătului $x'_3 = c$ i se aplică forțele

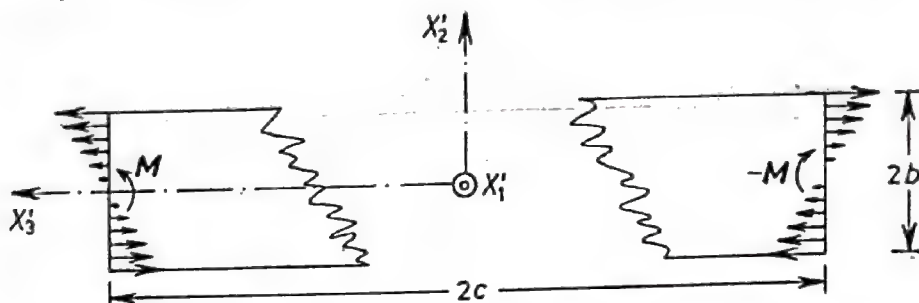


Fig. 54.1. Încovoierea unei bare cristaline — sistemul special de coordonate, eforturile și momentele de încovoiere.

$P = kx'_2q$ (pe unitatea de suprafață), iar capătului $x'_3 = -c$ i se aplică forțele $-P$.

Momentul de încovoiere al forțelor aplicate capătului $x'_3 = c$ este

$$\begin{aligned} M &= \int_S x'_2 n \times P \, dS = \int_{-a}^a \int_{-b}^b x'_2 n \times k x'_2 q \, dx'_1 \, dx'_2 = \\ &= \frac{4}{3} ab^3 k m; \end{aligned} \quad (54.1)$$

de unde se obține $k = 3M/4ab^3$ și exprimăm condițiile la limită de la capetele barei, $x'_3 = \pm c$. Ele sînt egale cu $\sigma \cdot (\pm q) = \pm(3M/4ab^3)x'_2q$. Aceste condiții la limită (cît și ecuațiile echilibrului elastic) sînt satisfăcute de tensorul tensiunilor

$$\sigma = \frac{3M}{4ab^3} x'_2 qq; \quad (54.2)$$

în sistemul de coordonate special fiind diferită de zero numai o singură componentă a sa, $\sigma'_3 = (3M/4ab^3)x'_2$. Conform legii Hooke, componentele tensorului deformărilor sînt

$$\epsilon'_\lambda = \frac{3M}{4ab^3} s'_{\lambda 3} x'_2. \quad (54.3)$$

Ca și în formulele precedente, semnele „prim” înseamnă că mărimea tensorială dată nu se referă la un sistem de coordonate cristalografic, ci la sistemul special de coordonate. Astfel, coeficienții $s'_{\lambda 3}$ nu coincid nici pe departe cu valorile tabelate ale coeficienților de deformabilitate elastică, de îndată ce muchiile barei nu sînt orientate după axele corespunzătoare ale sistemului de coordonate cristalofizic; ele sînt legate de valorile tabelate ale coeficienților de deformabilitate elastică ai unui cristal dat, $s_{\mu\nu}$, prin relațiile

$$s'_{\lambda 3} = P_{\lambda'\mu} P_{3'\nu} s_{\mu\nu},$$

în care elementele matricei de transformare, $P_{\lambda'\nu}$, sînt determinate de cosinuşii unghiurilor dintre axele de coordonate ale sistemului special și cele ale sistemului cristalofizic, $c_{i'j} = \cos (X'_i X_j)$, așa cum se arată în anexa F.

Încovoierea barei se caracterizează prin variația continuă a componentei φ'_1 a vectorului micilor rotații, în cazul deplasării de-a lungul barei, adică în direcția axei X'_3 : încovoierea este $\psi = \partial\varphi'_1/\partial x'_3$. Conform formulei (49.17),

$$\frac{\partial\varphi'_1}{\partial x'_3} = \text{Rot } \epsilon'_{13}.$$

Calculînd după formula (49.13) membrul din dreapta al acestei egalități, obținem

$$\psi = \frac{\partial\epsilon'_{33}}{\partial x'_2} - \frac{\partial\epsilon'_{23}}{\partial x'_3} = \frac{\partial\epsilon'_3}{\partial x'_2} - \frac{1}{2} \frac{\partial\epsilon'_4}{\partial x'_3}. \quad (54.4)$$

Înlocuind aici expresia pentru componentele tensorului deformărilor, (54.3), vom obține

$$\psi = \frac{3s'_{33}}{4ab^3} M. \quad (54.5)$$

Raportul $D = M/\psi$ se numește, de obicei, *rigiditatea barei la încovoiere*. Remarcînd că $1/s'_{33}$ este modulul Young, $E(q)$, în direcția lungimii barei, obținem

$$D(q) = \frac{4}{3} ab^3 E(q). \quad (54.6)$$



Se constată deci că rigiditatea la încovoiere nu depinde de orientarea vectorilor \mathbf{m} și \mathbf{n} (cînd direcția vectorului \mathbf{q} este dată).

Spre deosebire de corpurile izotrope, corpurile anizotrope se răsucesc atunci cînd sînt încovoiate. Este firesc ca răsucirea barei să fie definită prin variația componentei φ'_3 a vectorului axial al micilor rotații de-a lungul axei barei, X'_3 , adică prin derivata $\theta = \partial \varphi'_3 / \partial x'_3$. Folosind din nou formulele (49.17) și (49.13), obținem

$$\theta = \frac{\partial \varepsilon'_{23}}{\partial x'_1} - \frac{\partial \varepsilon'_{13}}{\partial x'_2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varepsilon'_4}{\partial x'_1} - \frac{\partial \varepsilon'_5}{\partial x'_2} \right), \quad (54.7)$$

în care, introducînd expresia (54.3) pentru componentele tensorului deformărilor, găsim

$$\theta = - \frac{3s'_{35}}{8ab^3} M. \quad (54.8)$$

Observînd că

$$s'_{35} = 2s'_{3331} = 2\mathbf{q}\mathbf{q} : \mathbf{s} : \mathbf{q}\mathbf{m},$$

vom raporta răsucirea la un sistem de coordonate arbitrar

$$\theta = - \frac{3M}{4ab^3} s_{ijkl} q_i q_j q_k m_l. \quad (54.9)$$

Această formulă este valabilă, în particular, și într-un sistem de coordonate cristalofizic. Pentru ca în calcule să poată fi utilizate direct valorile tabelate ale coeficienților deformabilității elastice $s_{\lambda\mu}$, este oportun ca formula (54.9) să fie adusă la forma

$$\theta = - \frac{3M}{8ab^3} s_{\lambda\mu} (\mathbf{q}\mathbf{q})_\lambda (\mathbf{q}\mathbf{m} + \mathbf{m}\mathbf{q})_\mu; \quad (\mathbf{q}\mathbf{q})_\lambda = q_i q_j \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6), \quad (54.10)$$

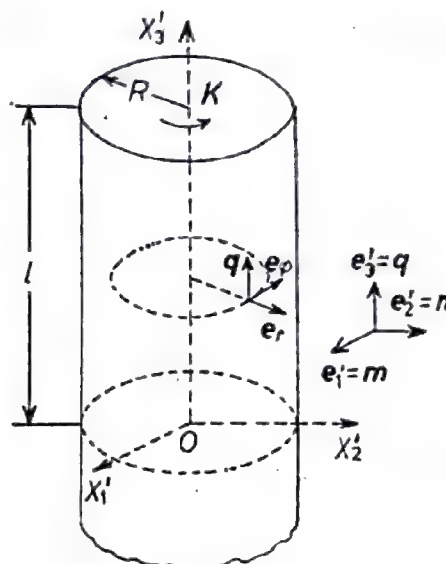
$$(\mathbf{q}\mathbf{m} + \mathbf{m}\mathbf{q})_\mu = q_k m_l + m_k q_l \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6).$$

Prin încovoiere, volumul barei nu variază: alungirea uneia dintre jumătăți este compensată de scurtarea celeilalte jumătăți.

Torsionarea unei bare cristaline cilindrice. Să studiem o bară cilindrică, anizotropă, de rază R și de lungime $2l$, la capetele căreia se aplică momentele de torsiune \mathbf{K} și $-\mathbf{K}$, suprafața ei laterală fiind liberă de sarcini. Vom introduce un sistem de coor-

donate cartezian, special, în general diferit de sistemul cristalofizic, avînd originea în centrul barei, a cărei axă X'_3 (cu versorul $e'_3 = q$) coincide cu axa barei; celelalte axe, X'_1 și X'_2 (cu versorii $e'_1 = m$ și $e'_2 = n$) fiind perpendiculare la axa X'_3 și ortogonale între ele, în rest fiind arbitrare. În afară de aceasta, să introducem în fie-

Fig. 54.2. Torsiunea unei bare cilindrice — sistemul de coordonate special și sistemul de coordonate local.



care punct un sistem de coordonate local, construit pe versorii e_r , e_φ și q , orientați după coordonatele liniare ale unui sistem de coordonate cilindric (fig. 54.2). Sistemul de coordonate cilindric este legat de reperul special prin relațiile

$$x'_1 = r \cos \varphi, \quad x'_2 = r \sin \varphi.$$

Momentul de torsiune, K , poate fi determinat, în particular, de forțele $P = kre_\varphi$, aplicate capătului $x'_3 = l$, raportate la unitatea de suprafață. Atunci

$$K = \int_S \mathbf{r} \times \mathbf{P} dS = \int_0^{2\pi} \int_0^R r \mathbf{e}_r \times k r \mathbf{e}_\varphi r dr d\varphi = \frac{1}{2} \pi R^4 k q, \quad (54.11)$$

de unde găsim

$$k = \frac{2K}{\pi R^4}.$$

Condițiile la limită

$$\sigma \cdot q = \frac{2K}{\pi R^4} r \mathbf{e}_\varphi, \quad \sigma \cdot \mathbf{e}_r = 0$$

sînt satisfăcute de tensorul tensiunilor

$$\sigma = \frac{2K}{\pi R^4} r(e_\varphi q + q e_\varphi). \quad (54.12)$$

Pentru a-l exprima pe acesta în sistemul de coordonate special, vom observa că

$$r e_\varphi = x'_1 n - x'_2 m.$$

Prin urmare,

$$\sigma = \frac{2K}{\pi R^4} [x'_1 (nq + qn) - x'_2 (mq + qm)]. \quad (54.13)$$

Pentru calculul deformărilor, să scriem componentele tensorului tensiunilor sub forma

$$\sigma'_\mu = \frac{2K}{\pi R^4} (x'_1 \delta_{4\mu} - x'_2 \delta_{5\mu}); \quad (54.14)$$

această formă de exprimare rezultă direct din (54.13). Deformările sînt egale cu

$$\varepsilon'_\lambda = \frac{2K}{\pi R^4} (s'_{\lambda 4} x'_1 - s'_{\lambda 5} x'_2). \quad (54.15)$$

Torsionarea de-a lungul axei, pe o unitate de lungime a barei, este egală cu

$$\theta = \frac{\partial \varphi'_3}{\partial x'_3}.$$

Utilizînd, din nou, formulele (49.17) și (43.13), găsim

$$\theta = \frac{\partial \varepsilon'_{23}}{\partial x'_1} - \frac{\partial \varepsilon'_{13}}{\partial x'_2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varepsilon'_4}{\partial x'_1} - \frac{\partial \varepsilon'_5}{\partial x'_2} \right). \quad (54.16)$$

Ținînd cont de (54.15), obținem

$$\theta = \frac{K}{\pi R^4} (s'_{44} + s'_{55}). \quad (54.17)$$

Raportul $C = K/0$ se numește *rigiditatea barei la torsiune*; evident,

$$C = \frac{\pi R^4}{(s'_{44} + s'_{55})}. \quad (54.18)$$

Pentru a exprima rigiditatea prin valorile tabelate ale coeficienților de deformabilitate elastică, să examinăm expresia

$$\frac{1}{4} (s'_{44} + s'_{55}) = s'_{2323} + s'_{1313} = s'_{2323} + s'_{1313} + s'_{3333} - s'_{3333} = s'_{k3k3} - s'_{3333}.$$

Aici, coeficienții deformabilității elastice sînt, ca și mai înainte, raportați la sistemul special de coordonate, ei putînd fi exprimați însă acum cu ajutorul versorului unic, q , care este orientat după axa de coordonate X_3 . Deoarece într-un sistem cartezian arbitrar de coordonate, această expresie poate fi pusă sub forma

$$s_{ijkl} q_j q_l - s_{ijkl} q_i q_j q_k q_l = s_{ijkl} (\delta_{ik} - q_i q_k) q_j q_l,$$

în care q_j sînt componentele vectorului unitar, q , al acestui sistem, rigiditatea barei la torsiune fiind

$$C(q) = \frac{\pi R^4}{4s_{ijkl}(\delta_{ik} - q_i q_k)q_j q_l}. \quad (54.19)$$

În cazul unui corp izotrop, $s_{44} = s_{55} = 1/G$ (G fiind modulul de forfecare), astfel încît rigiditatea sa la torsiune este

$$C = \frac{1}{2} \frac{\pi R^4}{G}.$$

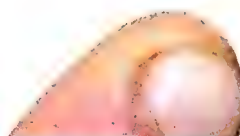
Din această cauză, mărimea

$$G(q) = \frac{2C(q)}{\pi R^4} = \frac{1}{2s_{ijkl}(\delta_{ik} - q_i q_k)q_j q_l} \quad (54.20)$$

este denumită *modul de forfecare la torsiune al unui material anizotrop*. Cu ajutorul tenscrului de material simetric, de rangul doi, $Z_{jl} = s_{ijkl}$, și al formulei (53.9), se poate reprezenta mărimea inversă modulului de forfecare, $G^{-1}(q)$, într-un mod adecvat pentru calcule

$$G^{-1}(q) = 2(q \cdot Z \cdot q - E^{-1}(q)), \quad (54.21)$$

unde $E^{-1}(q)$ este mărimea inversă modulului lui Young. Forma tensorului Z , pentru toate clasele de simetrie elastice, este dată în tabelul 54.1.



Tensorul $Z_{ij} = s_{ikik}$ pentru toate clasele cristalografice și clasele limită

Sistemele	$Z_{ij} = s_{ikik}$
Sistemul triclinic	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{4}s_{55} + \frac{1}{4}s_{66} & \frac{1}{4}s_{45} + \frac{1}{2}s_{16} + \frac{1}{4}s_{26} & \frac{1}{4}s_{61} + \frac{1}{4}s_{35} + \frac{1}{2}s_{15} \\ \frac{1}{4}s_{45} + \frac{1}{2}s_{16} + \frac{1}{2}s_{26} & s_{22} + \frac{1}{4}s_{66} + \frac{1}{4}s_{44} & \frac{1}{4}s_{56} + \frac{1}{2}s_{24} + \frac{1}{2}s_{34} \\ \frac{1}{4}s_{61} + \frac{1}{2}s_{35} + \frac{1}{2}s_{15} & \frac{1}{4}s_{56} + \frac{1}{2}s_{24} + \frac{1}{2}s_{34} & s_{33} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{55} \end{array}$
Sistemul monoclinic $2 \parallel X_2$	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{4}s_{55} + \frac{1}{4}s_{66} & 0 & \frac{1}{4}s_{61} + \frac{1}{2}s_{35} + \frac{1}{2}s_{15} \\ 0 & s_{22} + \frac{1}{4}s_{66} + \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ \frac{1}{4}s_{61} + \frac{1}{2}s_{35} + \frac{1}{2}s_{15} & 0 & s_{33} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{55} \end{array}$
$2 \parallel X_3$	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{4}s_{55} + \frac{1}{4}s_{66} & \frac{1}{4}s_{45} + \frac{1}{2}s_{16} + \frac{1}{2}s_{26} & 0 \\ \frac{1}{4}s_{45} + \frac{1}{2}s_{16} + \frac{1}{2}s_{26} & s_{22} + \frac{1}{4}s_{66} + \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{55} \end{array}$
Sistemul rombic	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{4}s_{55} + \frac{1}{4}s_{66} & 0 & 0 \\ 0 & s_{22} + \frac{1}{4}s_{66} + \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{55} \end{array}$
Sistemul tetragonal	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{66} & 0 & 0 \\ 0 & s_{11} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{66} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} + \frac{1}{2}s_{44} \end{array}$
Sistemele trigonal și hexagonal și texturile	$\begin{array}{ccc} \frac{3}{4}s_{11} - \frac{1}{2}s_{12} + \frac{1}{4}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}s_{11} + \frac{1}{4}s_{44} + \frac{1}{4}s_{66} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} + \frac{1}{2}s_{44} \end{array}$
Sistemul cubic	$\begin{array}{ccc} s_{11} + \frac{1}{2}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & s_{11} + \frac{1}{2}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & s_{11} + \frac{1}{2}s_{44} \end{array}$
Corpurile izotrope	$\begin{array}{ccc} 2s_{11} - \frac{1}{2}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 2s_{11} - s_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 2s_{11} - s_{12} \end{array}$

Dat fiind că barele anizotrope se torsionează la încovoiere, ne putem aștepta ca ele să se încovoie la torsiune. Și, într-adevăr, calculînd

$$\psi'_1 = \frac{\partial \varphi'_1}{\partial x'_3} = \frac{\partial \epsilon'_{33}}{\partial x'_2} - \frac{\partial \epsilon'_{23}}{\partial x'_3} = -\frac{2K}{\pi R^4} s'_{35},$$

$$\psi'_2 = \frac{\partial \varphi'_2}{\partial x'_3} = \frac{\partial \epsilon'_{13}}{\partial x'_3} - \frac{\partial \epsilon'_{33}}{\partial x'_1} = -\frac{2K}{\pi R^4} s'_{34},$$

vom găsi că axa de încovoiere este paralelă cu vectorul $s'_{35} \mathbf{m} + s'_{34} \mathbf{n}$, valoarea ei absolută fiind egală cu

$$\psi = \frac{2K}{\pi R^4} \sqrt{(s'_{35})^2 + (s'_{34})^2}.$$

Și această expresie depinde numai de orientarea cristalografică a axei barei, adică de componentele q_i ale versorului său, \mathbf{q} . Într-un sistem de coordonate arbitrar, în particular, în sistemul de coordonate cristalofizic,

$$\psi = \frac{4K}{\pi R^4} \sqrt{\mathbf{q} \mathbf{q} \mathbf{q} : \mathbf{s} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{q} \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} : \mathbf{q} \mathbf{q} \mathbf{q}}.$$

Suprafețele modulului lui Young, $E(\mathbf{q})$, ale coeficienților de dilatare, $E^{-1}(\mathbf{q})$, de torsiune, $G^{-1}(\mathbf{q})$ și ai lui Poisson, $\nu(\mathbf{q})$, pentru o serie de cristale, sînt reprezentate în unele figuri din § 24 și în figurile 54.3 — 54.10. Pentru cristalele din sistemul cubic, suprafețele sînt date în figurile 24.4, a și b și 24.7. Dacă tensorul deformabilității elastice, \mathbf{s} , pentru cristalele din sistemul cubic este scris sub forma (52.13), atunci ecuațiile suprafețelor $E^{-1}(\mathbf{q})$ și $G^{-1}(\mathbf{q})$ capătă forma

$$r = E^{-1}(\mathbf{q}) = S_I^{\{4\}} + S_N N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.22)$$

$$r = G^{-1}(\mathbf{q}) = \frac{4}{3} (S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) - 2S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.23)$$

în care coeficienții S sînt dați de formulele (52.15), iar nonorul N^0 , de formula (52.14). Astfel, razele vectoare ale acestor suprafețe constau dintr-un termen constant (în (54.22) $S_I^{\{4\}}$) și componenta normală a nonorului $N^0[m\bar{3}m]$, înmulțită cu un anumit coeficient (în (54.22) este $S_N^{\{4\}}$). Se poate spune că suprafețele (54.22) și (54.23) sînt combinații liniare ale suprafețelor scalarului unitate (sfere de rază $r = 1$) și a nonorului $N^0[m\bar{3}m]$ (v. figura 47.5). Prin urmare, suprafața reprezentată în figura 47.5 este o suprafață universală de anizotropie a proprietăților elastice ale tuturor cristalelor cubice. Ea arată, în particular, că planurile $\{111\}$ sînt planuri izotrope pentru ele, iar direcțiile $\langle 100 \rangle$ și $\langle 111 \rangle$ sînt extremale.

Suprafețele $E^{-1}(\mathbf{q})$ și $G^{-1}(\mathbf{q})$, pentru cristalele transversal-izotrope din punct de vedere elastic, sînt reprezentate în figura 24.6. Dacă tensorul s se scrie în forma (52.9) ecuațiile lor se pot scrie astfel

$$r = E^{-1}(\mathbf{q}) = S_I^{(4)} + S_D^{(4)} D_{ij}^0 q_i q_j + S_N^{(4)} N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.24)$$

$$r = G^{-1}(\mathbf{q}) = \frac{4}{3} (S_I^{(4)} - S_I^{(22)}) + \frac{1}{3} (S_D^{(4)} - S_D^{(22)}) D_{ij}^0 q_i q_j - \\ - 2S_N^{(4)} N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.25)$$

în care D^0 și N^0 sînt dați de formulele (52.10) și (52.11). Așadar, aceste suprafețe sînt combinații liniare între o sferă și suprafețele tensorilor $D^0[\infty/mm]$ și $N^0[\infty/mm]$ (fig. 47.1, *b* și *d*). Coeficienții dezvoltării caracterizează rolul pe care îl are fiecare dintre ceilalți tensori ireductibili la formarea suprafeței.

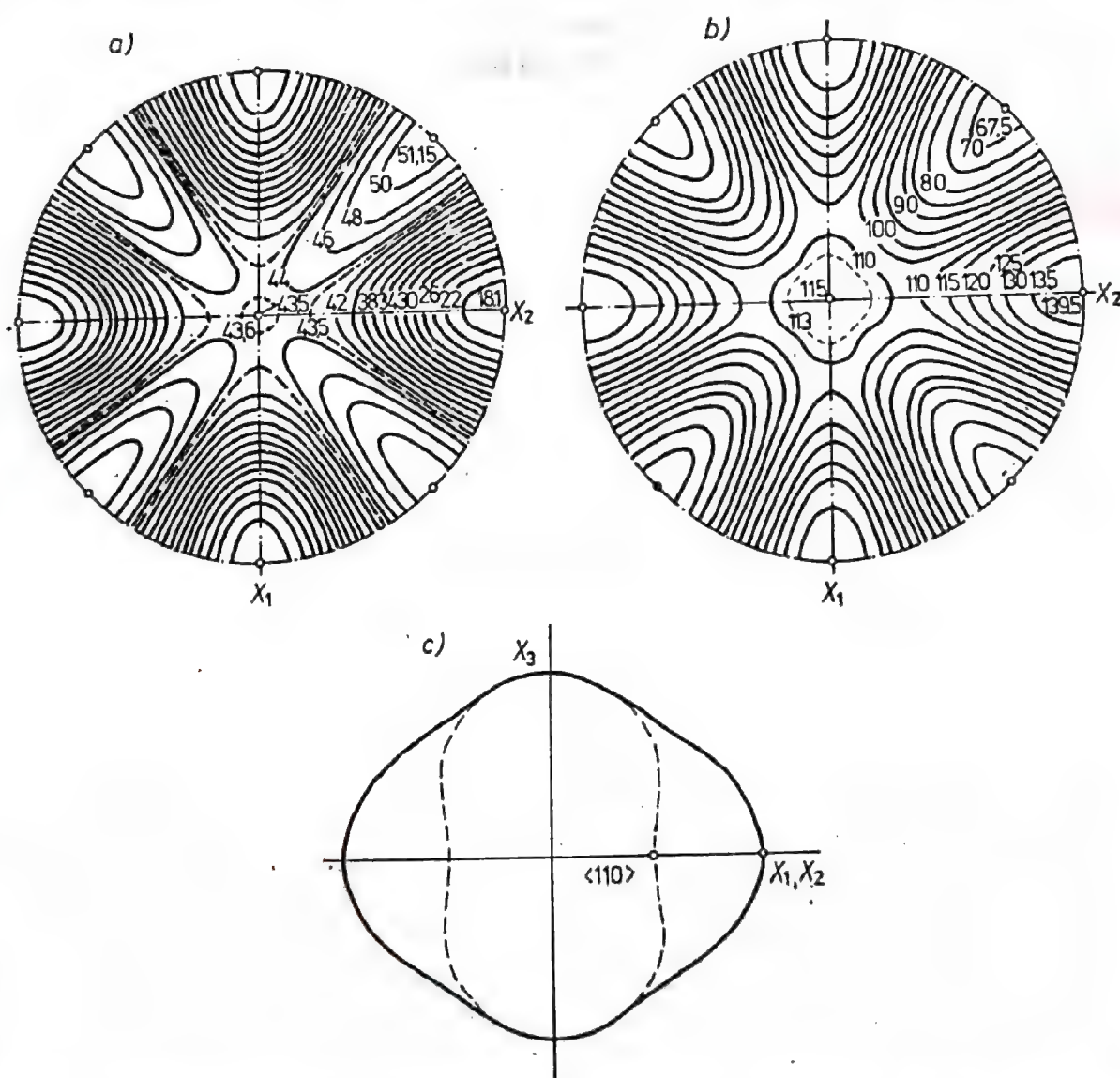


Fig. 54.3. Suprafețele proprietăților elastice pentru un cristal de dihidrofosfat de amoniu (ADP), clasa $\bar{4}2m$: a) $E^{-1}(\mathbf{q})$, proiecție stereografică; b) $G^{-1}(\mathbf{q})$, proiecție stereografică; în 10^{-13} cm²/dyn; c) $G^{-1}(\mathbf{q})$, secțiuni. Simetria suprafețelor este $4/mmm$.

În figurile 54.3 — 54.5 sînt date proiecțiile stereografice și secțiunile suprafețelor proprietăților elastice ale cristalelor din sistemul tetragonal. Aceste suprafețe pot fi puse sub formă de combinații liniare între o sferă și suprafețele $D^0[\infty/mm]$, $N^0[\infty/mm]$ și $N^0[m3m]$. După cum se vede din figura 54.5, și cristalele din clasa Laue $4/m$ au simetria proprietăților elastice tot $4/mmm$, numai că planurile de simetrie ale proprietăților elastice nu sînt, la ele, legate de reperul cristalofizic.

Suprafețele $E^{-1}(q)$ și $G^{-1}(q)$ ale cristalelor din sistemul trigonal (figurile 24.8 — 24.11, 54.6 și 54.7) sînt tot combinații liniare

Fig. 54.4. Proiecția stereografică a suprafeței coeficientului de torsiune, $G^{-1}(q)$, a unui cristal de dihidrofosfat de potasiu (KDP), clasa $\bar{4}2m$. Simetria suprafeței este $4/mmm$. În $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$.

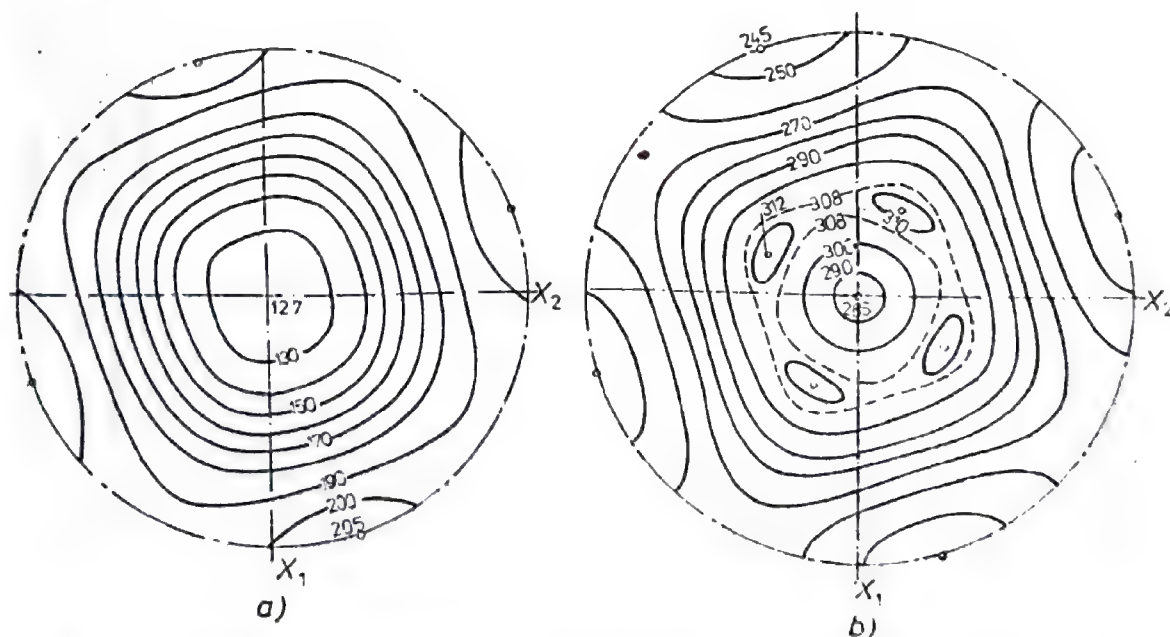
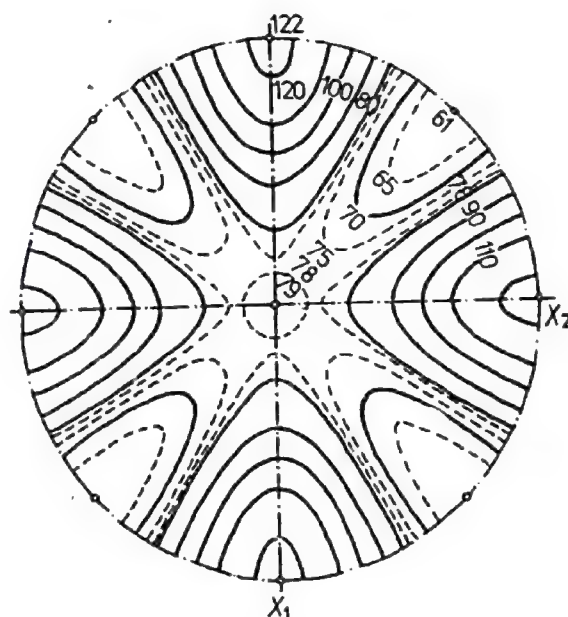


Fig. 54.5. Proiecțiile stereografice ale suprafețelor : a) coeficientului de întindere, $E^{-1}(q)$; b) coeficientului de torsiune, $G^{-1}(q)$ ale cristalului de pentaeritrit, clasa $\bar{4}$, clasa Laue $4/m$. Simetria suprafețelor este $4/mmm$. În $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$.

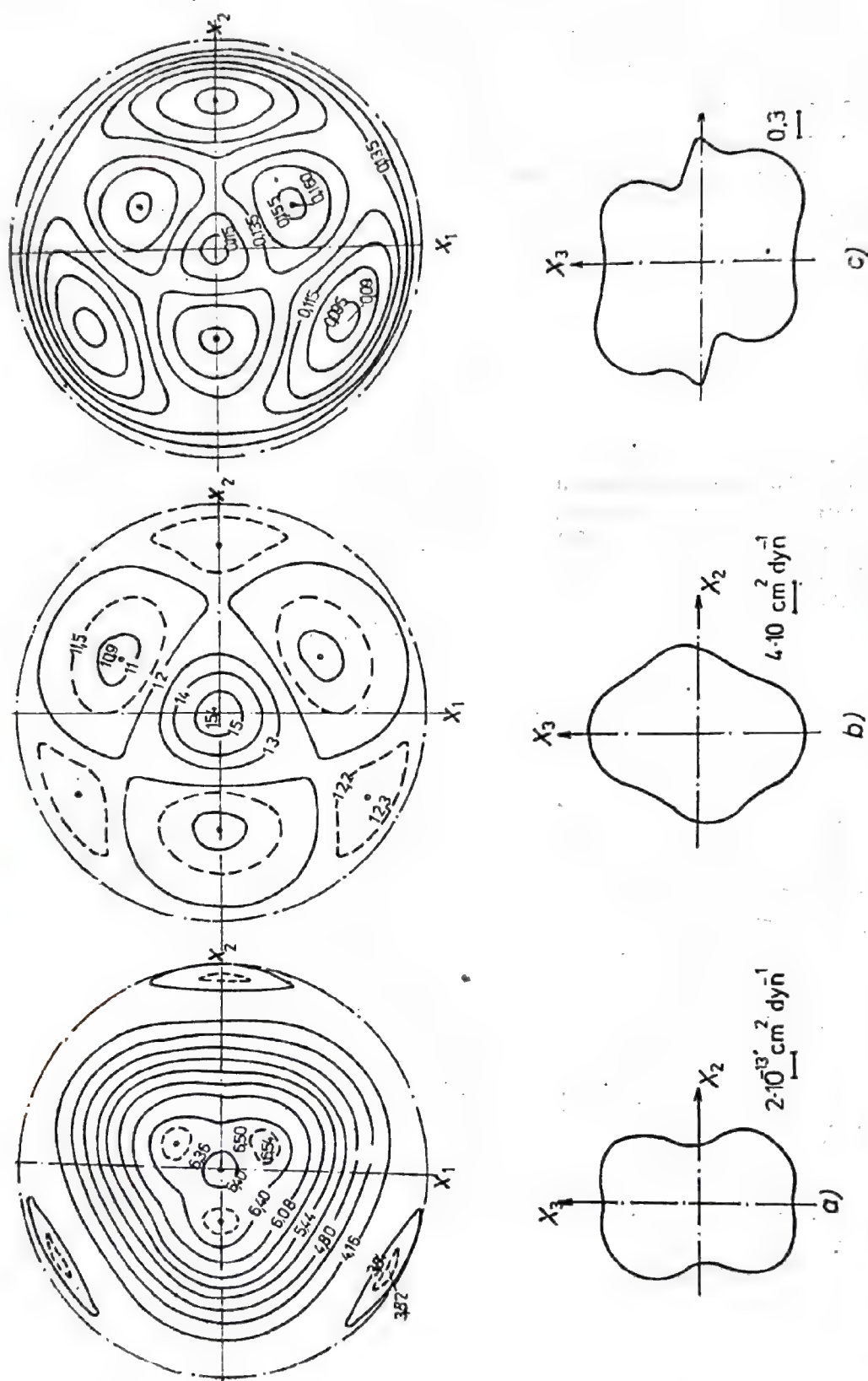


Fig. 54.6. Proiecțiile stereografice (rîndul de sus) și secțiunile în planul X_2X_3 (rîndul de jos) ale suprafețelor proprietăților elastice pentru cristalul de turmalină, clasa 3m: a) a coeficientului de înfrîngere, $E^{-1}(q)$, în $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$; b) a coeficientului de torsune, $G^{-1}(q)$, în $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$; c) a coeficientului Poisson $\nu(q)$. Simetria suprafețelor este 3m. Planul X_2X_3 este izotrop.

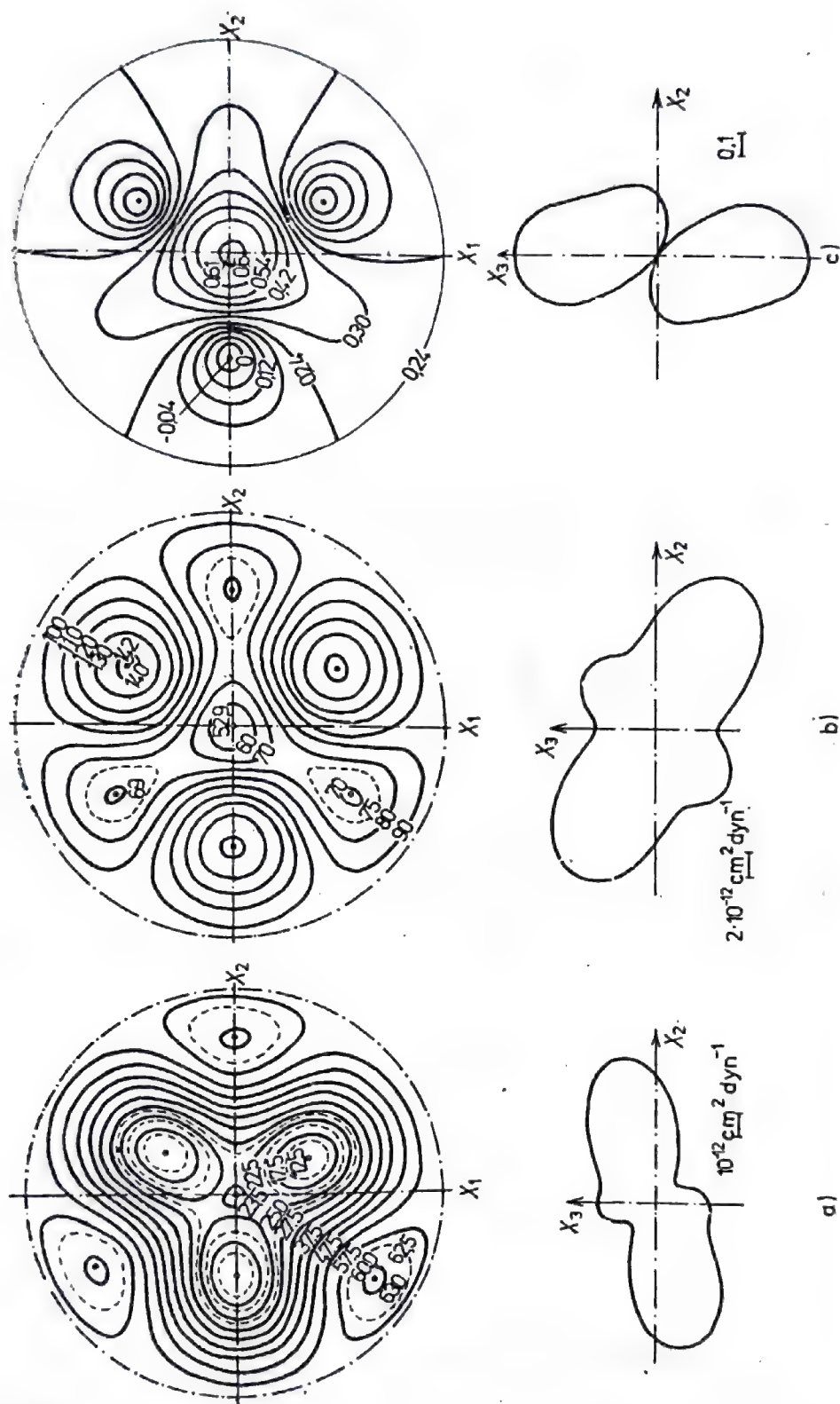


Fig. 54.7. Proiecțiile stereografice (rîndul de sus) și secțiunile cu planul X_2X_3 (rîndul de jos) ale suprafețelor proprietăților elastice pentru cristalul de telur, clasa 32 : a) a coeficientului de întindere, $E^{-1}(q)$; în $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$; b) a coeficientului de torsune, $G^{-1}(q)$; în $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$; c) a coeficientului Poisson, $\nu(q)$. Simetria suprafețelor este $3m$. Planul X_1X_2 este izotrop.

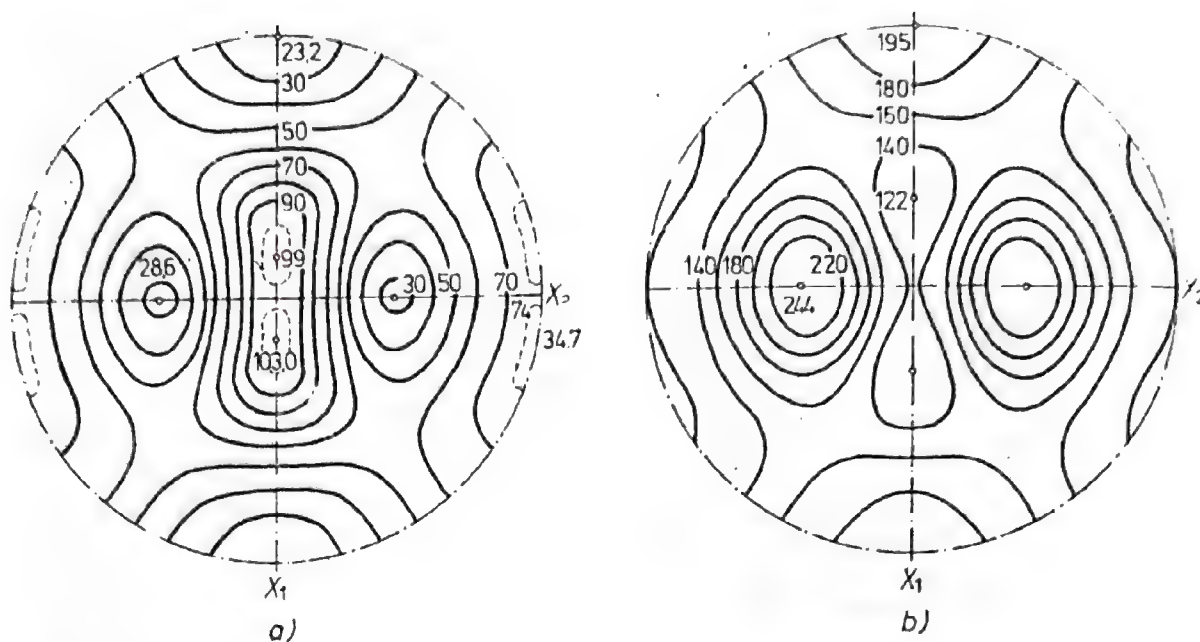


Fig. 54.8. Proiecțiile stereografice ale suprafețelor: a) coeficientului de întindere $E^{-1}(\mathbf{q})$; b) coeficientului de torsiune $G^{-1}(\mathbf{q})$ ale cristalului de $\text{KB}_5\text{O}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ clasa $mm2$; simetria suprafețelor este mmm . În $10^{-13} \text{ cm}^2/\text{dyn}$.

între o sferă și suprafețele $D^0[\infty/mm]$, $N^0[\infty/mm]$ și $N^0[m3m]$, dar aceasta se ia în configurație „romboedrică” (v. fig. 47,5, b). Deoarece planul X_1X_2 , adică (0001), este izotrop pentru toate componentele, el va fi izotrop și pentru proprietățile elastice, ceea ce este confirmat de toate aceste figuri. În figura 54.7, c se vede că pentru cristale, coeficientul Poisson, $\nu(\mathbf{q})$, capătă nu numai valori negative, ci și valori chiar mai mari ca 0,05, ceea ce, în cazul corpurilor izotrope nu este posibil (vezi formula (63.23)).

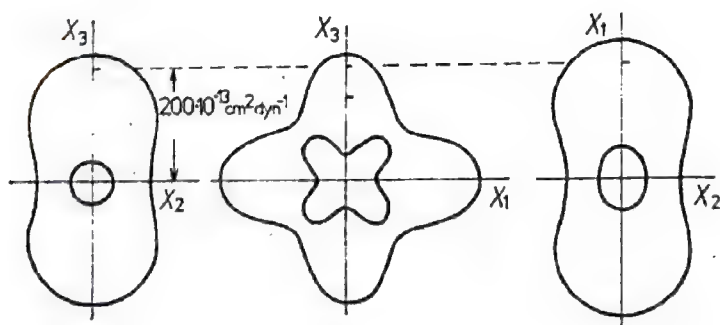
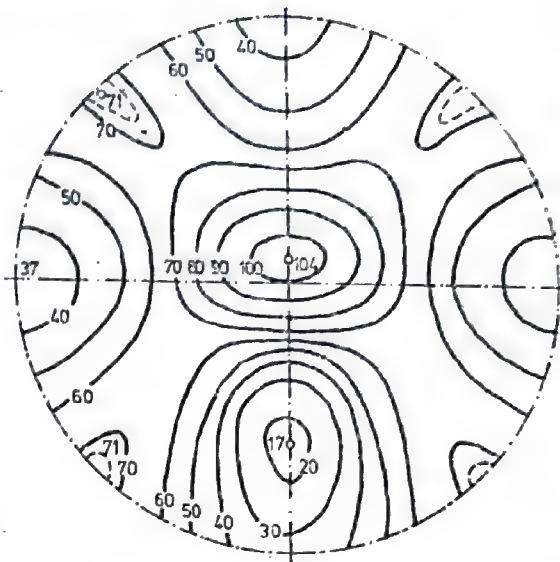


Fig. 54.9. Secțiunile cu planurile de coordonate ale suprafețelor coeficientului de întindere, $E^{-1}(\mathbf{q})$ (suprafața interioară) și coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\mathbf{q})$ (suprafața exterioară) ale cristalului de sare Seignette, clasa 222. Simetria suprafețelor este mmm (Woster, 1949).

Suprafețele proprietăților elastice ale cristalelor din sistemul rombic, date în figurile 24.5, 54.8 și 54.9, se pot obține prin combinarea liniară a setului pentru cristalele tetragonale, completată cu figura 47.6. În sfârșit, în figura 54.10 este reprezentată suprafața $E^{-1}(\mathbf{q})$ pentru un cristal din sistemul monoclinic.

Fig. 54.10. Proiecția stereografică a suprafeței coeficientului de întindere, $E^{-1}(\mathbf{q})$, al cristalului de etilendiamintartrat (EDT), clasa 2. Simetria suprafeței este $2/m$. În 10^{-13} cm²/dyn.



Ecuațiile suprafețelor proprietăților elastice, în particular ecuațiile (54.22) — (54.25), se pot obține folosind metoda combinării liniare a ecuațiilor suprafețelor tensorilor unitari ireducibili, cuprinși în tabelul 47.4.

§ 55. TENSIUNILE TERMICE DIN CRISTALE

Ecuațiile echilibrului elastic, $\text{Div } \sigma = 0$, și cele de compatibilitate a deformărilor, $\text{Ink } \varepsilon = 0$, sînt adevărate indiferent dacă întregul cristal se află la aceeași temperatură, sau dacă temperatura variază de la un punct la altul. În cel de al doilea caz însă va fi necesar ca în legea lui Hooke să fie incluși termenii ce depind de temperatură,

$$\varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu} \sigma_\mu + \alpha_\lambda \Theta, \quad \varepsilon = s : \sigma + \alpha \Theta. \quad (55.1)$$

Drept urmare, ecuația Beltrami-Mitchell devine neomogenă : în locul relației (51.17) obținem

$$\text{Ink } (s : \sigma) = - \text{Ink } (\alpha \Theta). \quad (55.2)$$

În cîmpuri termice omogene, toate corpurile omogene, fie că sînt fie că nu sînt izotrope, se dilată complet liber, dacă acestei dilatări nu i se opun corpurile înconjurătoare. În cîmpuri termice neomogene unele părți ale corpului împiedică dilatarea liberă a celorlalte părți ale corpului, ceea ce provoacă apariția tensiunilor termice într-un corp omogen a cărui suprafață nu este supusă la nici un fel de sarcini. Teorema univocității soluției ecuațiilor teoriei elasticității arată că pentru apariția tensiunilor termice

trebuie ca ecuația Beltrami-Mitchell, (55.2), să fie neomogenă. Aceasta se realizează numai pentru $\text{Ink}(\alpha\Theta) \neq 0$; de aici rezultă că tensiunile termice nu apar numai în câmpurile termice omogene, ci și în câmpurile termice care depind liniar de coordonatele carteziene.

Mai mult chiar, condiția $\text{Ink}(\alpha\Theta) \neq 0$ nu este numai necesară, ci și suficientă, pentru ca să apară tensiunile termice. Într-adevăr dacă acestea nu există, atunci tensorul deformărilor este $\varepsilon = \alpha\Theta$, pe când el trebuie să satisfacă ecuația de compatibilitate $\text{Ink} \varepsilon = 0$.

Deoarece suprafața cristalului este liberă, neexistând nici un fel de sarcini, atât tensorul tensiunilor termice cât și momentul mediu al acestui tensor vor fi egali cu zero, ceea ce rezultă direct din formulele (50.15) și (50.16). Acest fapt este deseori folosit când se abordează probleme referitoare la distribuția tensiunilor termice.

Aici vom examina una dintre cele mai simple probleme de acest gen, și anume problema tensiunilor termice într-o lamelă cristalină de grosime $2a$, a cărei temperatură variază numai cu grosimea (Indenbom, Silvestrova, Sirotin, 1956).

Să introducem un sistem cartezian de coordonate, $OX'_1X'_2X'_3$, cu originea în planul mediu al lamelei. Fie ca axele rectangulare X'_1 și X'_2 să se afle în planul mediu al lamelei, iar axa X'_3 să fie orientată după normala la lamelă. Este evident că nu numai temperatura, dar nici deformările și nici tensiunile nu vor depinde nici de x'_1 , nici de x'_2 .

Ecuațiile echilibrului elastic au deci forma

$$\frac{d\sigma'_{i3}}{dx'_3} = 0 \quad (55.3)$$

(prin accent se notează faptul că componentele tensorului σ sînt raportate la sistemul $X'_1X'_2X'_3$). Soluțiile lor, σ'_{i3} , sînt niște constante, toate fiind egale cu zero, deoarece, conform relației (50.15),

$$\langle \sigma'_{i3} \rangle = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \sigma'_{i3} dx'_3 = 0.$$

Așadar,

$$\sigma'_3 = \sigma'_4 = \sigma'_5 = 0, \quad (55.4)$$

astfel încît diferite de zero sînt numai trei dintre componente, σ'_1 , σ'_2 și σ'_6 .

Din ecuațiile de compatibilitate, așa cum s-a arătat în § 49 (formulele (49.20)), rezultă că

$$\varepsilon'_\lambda = A'_\lambda + x'_3 B'_\lambda \quad (\lambda = 1, 2, 6), \quad (55.5)$$

A'_λ și B'_λ fiind numere ce nu depind de x'_3 .

Ținând cont de (55.4), legea Hooke (55.1) poate fi scrisă sub forma

$$A'_\lambda + x'_3 B'_\lambda = s'_{\lambda\mu} \sigma'_\mu + \alpha'_\lambda \Theta \quad (\lambda, \mu = 1, 2, 6) \quad (55.6)$$

(celelalte trei egalități, care intră în legea generalizată a lui Hooke nu interesează).

Să mediem egalitatea (55.6) pe întreaga lamelă, adică să integram ambele părți ale ei în raport cu x'_3 , de la $-a$ la a , iar rezultatul să-l împărțim la $2a$. Ținând cont de faptul că tensorul tensiunilor, mediat, este egal cu zero, obținem

$$A'_\lambda = \alpha'_\lambda \langle \Theta \rangle \quad (\lambda = 1, 2, 6). \quad (55.7)$$

Înmulțim acum ambele părți ale egalității (55.6) cu x'_3 și efectuăm din nou medierea după întreaga lamelă. Folosind faptul că și momentul tensorului tensiunilor, mediat, este egal cu zero, obținem

$$B'_\lambda = \frac{3}{a^2} \alpha'_\lambda \langle x'_3 \Theta \rangle \quad (\lambda = 1, 2, 6). \quad (55.8)$$

Prin urmare, am găsit cele trei componente ale tensorului deformărilor

$$\varepsilon'_\lambda = \alpha'_\lambda \left(\langle \Theta \rangle + \frac{3}{a^2} x'_3 \langle x'_3 \Theta \rangle \right) \quad (\lambda = 1, 2, 6) \quad (55.9)$$

Cele trei egalități (55.6), transcrise în forma

$$s'_{\lambda\mu} \sigma'_\mu = \alpha'_\lambda \left(\langle \Theta \rangle + \frac{3}{a^2} x'_3 \langle x'_3 \Theta \rangle - \Theta \right) \quad (\lambda, \mu = 1, 2, 6) \quad (55.10)$$

pot fi considerate drept un sistem de trei ecuații liniare în cele trei componente necunoscute ale tensorului tensiunilor, $\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_6$. Acest sistem se rezolvă ușor, dacă știm matricea $d'_{x\lambda}$, care este inversa matricei $s'_{\lambda\mu}$:

$$d'_{x\lambda} s'_{\lambda\mu} = \delta_{x\mu} \quad (x, \lambda, \mu = 1, 2, 6). \quad (55.11)$$

Cîmpul tensiunilor este dat de formulele

$$\sigma'_x = \begin{cases} d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda \left(\langle \Theta \rangle + \frac{3}{a^2} x'_3 \langle x'_3 \Theta \rangle - \Theta \right) & (x, \lambda = 1, 2, 6), \\ 0 & (x = 3, 4, 5). \end{cases} \quad (55.12)$$

De aici, folosindu-ne de legea Hooke, (55.1), se pot obține și cele trei componente ale tensorului deformărilor rămase încă nedeterminate.

Dacă câmpul termic este simetric în raport cu planul mediu al lamelei: $\Theta(-x'_3) = \Theta(x'_3)$, atunci momentul său mediu, $\langle x'_3 \Theta \rangle$, se anulează, astfel încât în loc de (55.12) avem

$$\sigma'_x = \begin{cases} d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda (\langle \Theta \rangle - \Theta) & (x, \lambda = 1, 2, 6), \\ 0 & (x = 3, 4, 5). \end{cases} \quad (55.13)$$

Un câmp termic simetric în raport cu planul mediu al lamelei se obține, în particular, la o încălzire uniformă a lamelei (v. § 33). În notațiile acestui paragraf, formula dedusă acolo, (33.12), ia forma

$$\Theta - \langle \Theta \rangle = \frac{ha^2}{6k'_3} \left[3 \left(\frac{x'_3}{a} \right)^2 - 1 \right], \quad (55.14)$$

unde h este viteza de creștere a temperaturii, $k'_3 = k'_{33}$ sînt componentele tensorului conductibilității termice în sistemul $X'_1 X'_2 X'_3$, iar a este semigrosimea lamelei. Prin urmare, în cazul unei încălziri uniforme a peliculei cristaline, în ea apar tensiuni termoelastice

$$\sigma'_x = \begin{cases} \frac{d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda ha^2}{6k'_3} \left[1 - 3 \left(\frac{x'_3}{a} \right)^2 \right] & (x, \lambda = 1, 2, 6), \\ 0 & (x = 3, 4, 5). \end{cases} \quad (55.15)$$

Prin încălzire lamela este de obicei comprimată dinspre margini acolo tensiunile fiind egale cu

$$\sigma'_x(\pm a) = - \frac{d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda h a^2}{3k'_3}$$

și întinsă la mijloc; în planul mediu al lamelei tensiunile sînt

$$\sigma'_x(0) = \frac{d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda h a^2}{6k'_3}.$$

Prin răcirea peliculei $h < 0$, deci toate tensiunile vor fi contrare celor care apar la încălzire (este rezolvată și problema tensiunilor termice care apar la încălzirea uniformă a unor cilindri cristalini; vezi Sirotin, 1965).

Coeficienții $\gamma'_x = d'_{x\lambda} \alpha'_\lambda$ pentru lamelele cristaline de diverse orientări sînt cuprinși în tabelul 55.1. Ca dimensiune, și chiar ca ordin de mărime, ei coincid cu coeficienții termoelasticității, (v.

Coeficienții termoelastici, γ'_x , pentru lamele cristaline

Sistemele și clasele	Orientările lamelor și alegerea axelor X'_1 și X'_2	Coeficienții γ'_x
Sistemul triclinic	$X'_3 \parallel X_3 \perp (001)$ $X'_1 \parallel X_1$ $X'_2 \parallel X_2$	$\gamma'_1 = A_1 [(s_{22}s_{26} - s_{26}^2) \alpha_1 + (s_{16}s_{26} - s_{66}s_{12}) \alpha_2 + (s_{12}s_{26} - s_{22}s_{16}) \alpha_6],$ $\gamma'_2 = A_1 [(s_{16}s_{26} - s_{12}s_{66}) \alpha_1 + (s_{11}s_{66} - s_{16}^2) \alpha_2 + (s_{12}s_{16} - s_{11}s_{26}) \alpha_6],$ $\gamma'_6 = A_1 [(s_{12}s_{26} - s_{22}s_{16}) \alpha_1 + (s_{12}s_{16} - s_{11}s_{26}) \alpha_2 + (s_{11}s_{22} - s_{12}^2) \alpha_6];$ $1/A_1 = s_{11}s_{22}s_{66} + 2s_{12}s_{16}s_{26} - s_{11}s_{26}^2 - s_{22}s_{16}^2 - s_{66}s_{12}^2.$
	$X'_3 \parallel X_1$ $X'_1 \parallel X_3$ $X'_2 \parallel X_2$	$\gamma'_1 = A_2 [(s_{22}s_{44} - s_{24}^2) \alpha_3 + (s_{24}s_{34} - s_{44}s_{23}) \alpha_2 + (s_{23}s_{24} - s_{22}s_{34}) \alpha_4],$ $\gamma'_2 = A_2 [(s_{24}s_{34} - s_{44}s_{23}) \alpha_3 + (s_{33}s_{44} - s_{34}^2) \alpha_2 + (s_{23}s_{34} - s_{33}s_{24}) \alpha_4],$ $\gamma'_6 = A_2 [(s_{23}s_{24} - s_{22}s_{34}) \alpha_3 + (s_{23}s_{34} - s_{33}s_{24}) \alpha_2 + (s_{22}s_{33}s_{23}^2) \alpha_4];$ $1/A_2 = s_{22}s_{33}s_{44} + 2s_{23}s_{34}s_{24} - s_{22}s_{34}^2 - s_{33}s_{24}^2 - s_{44} - s_{23}^2.$
	$X'_3 \parallel X_2$ $X'_1 \parallel X_1$ $X'_2 \parallel X_3$	$\gamma'_1 = A_3 [(s_{33}s_{55} - s_{35}^2) \alpha_1 + (s_{15}s_{35} - s_{55}s_{13}) \alpha_3 + (s_{15}s_{35} - s_{33}s_{15}) \alpha_5],$ $\gamma'_2 = A_3 [(s_{15}s_{35} - s_{55}s_{13}) \alpha_1 + (s_{11}s_{55} - s_{15}^2) \alpha_3 + (s_{13}s_{15} - s_{11}s_{35}) \alpha_5],$ $\gamma'_6 = A_3 [(s_{13}s_{35} - s_{33}s_{15}) \alpha_1 + (s_{13}s_{15} - s_{11}s_{35}) \alpha_3 + (s_{11}s_{33} - s_{13}^2) \alpha_5];$ $1/A_3 = s_{11}s_{33}s_{55} + 2s_{13}s_{15}s_{35} - s_{11}s_{35}^2 - s_{33}s_{15}^2 - s_{55}s_{13}^2.$
Sistemul monoclinic	$X'_3 \parallel X_2 \perp (010)$ $X'_2 \parallel X_3 \parallel [001]$	$\gamma'_1 = A_3 [(s_{11}s_{55} - s_{15}^2) \alpha_3 + (s_{35}s_{15} - s_{55}s_{31}) \alpha_1 + (s_{31}s_{15} - s_{11}s_{35}) \alpha_5],$ $\gamma'_2 = A_3 [(s_{35}s_{15} - s_{55}s_{31}) \alpha_3 + (s_{33}s_{55} - s_{35}^2) \alpha_1 + (s_{31}s_{35} - s_{33}s_{15}) \alpha_5],$ $\gamma'_6 = A_3 [(s_{31}s_{15} - s_{11}s_{35}) \alpha_3 + (s_{31}s_{35} - s_{33}s_{15}) \alpha_1 + (s_{33}s_{11} - s_{31}^2) \alpha_5].$
	$X'_3 \parallel X_3 \parallel [001]$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_4 (s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2), \quad \gamma'_2 = A_4 (-s_{12}\alpha_1 + s_{11}\alpha_2), \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_4 = s_{11}s_{22} - s_{12}^2.$

Sistemele și clasele	Orientările lamelor și alegerea axelor X'_1 și X'_2	Coefficienții γ'_i
Sistemul monoclinic	$X'_3 \perp (001)$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [010]$ $\varphi = \beta - 90^\circ$	$\gamma'_1 = A_5 [(s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2) \cos^2 \varphi + (s_{22}\alpha_3 - s_{23}\alpha_2) \sin^2 \varphi - (s_{22}\alpha_5 - s_{25}\alpha_2) \sin \varphi \cos \varphi],$ $\gamma'_2 = A_5 \{ (s_{11}\alpha_2 - s_{12}\alpha_1) \cos^4 \varphi + (s_{33}\alpha_2 - s_{23}\alpha_3) \sin^4 \varphi +$ $+ [(2s_{31} + s_{55}) \alpha_2 - s_{23}\alpha_1 - s_{12}\alpha_3 - s_{25}\alpha_5] \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi + (s_{25}\alpha_1 - s_{15}\alpha_2 +$ $+ s_{12}\alpha_5) \cos^3 \varphi \sin \varphi + (-s_{35}\alpha_2 + s_{25}\alpha_3 + s_{23}\alpha_5) \cos \varphi \sin^3 \varphi \}, \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_5 = (s_{11}s_{22} - s_{12}^2) \cos^4 \varphi + (s_{22}s_{33} - s_{23}^2) \sin^4 \varphi +$ $+ (2s_{22}s_{31} - 2s_{12}s_{23} + s_{22}s_{55} - s_{25}^2) \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi -$ $- [(s_{22}s_{15} - s_{12}s_{25}) \cos^2 \varphi + (s_{22}s_{35} - s_{23}s_{25}) \sin^2 \varphi] \sin 2\varphi.$
Sistemul rombic	$X'_3 \parallel X_3 \perp (001)$ $X'_1 \parallel X_1 \parallel [100]$	$\gamma'_1 = A_4 (s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2), \quad \gamma'_2 = A_4 (-s_{12}\alpha_1 + s_{11}\alpha_2), \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_4 = s_{11}s_{22} - s_{12}^2.$
	$X'_3 \perp (h0l)$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_6 [h^2(c/a)^2 + l^2] [l^2 (s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2) + h^2(c/a)^2 (s_{22}\alpha_3 - s_{23}\alpha_2)],$ $\gamma'_2 = A_6 \{ l^4 (s_{11}\alpha_2 - s_{12}\alpha_1) + h^4 (c/a)^4 (s_{33}\alpha_2 - s_{23}\alpha_3) -$ $- h^2 l^2 (c/a)^2 [s_{23}\alpha_1 + s_{12}\alpha_3 - (2s_{31} + s_{55}) \alpha_2] \}, \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_6 = l^4 (s_{11}s_{22} - s_{12}^2) + h^4 (c/a)^4 (s_{33}s_{23} - s_{23}^2) + h^2 l^2 (c/a)^2 (2s_{22}s_{31} - 2s_{12}s_{23} + s_{22}s_{55}).$
Sistemul trigonal	$X'_3 \parallel X_3 \perp (0001)$	$\gamma'_1 = \gamma'_2 = \alpha_1/(s_{11} + s_{12}), \quad \gamma'_6 = 0.$
toate clasele	$X'_3 \parallel X_1 \perp (2\bar{1}10)$ $X'_1 \parallel X_3 \parallel [0001]$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [01\bar{1}0]$	$\gamma'_1 = A_7 [-s_{44}s_{13}\alpha_1 + (s_{11}s_{44} - s_{14}^2) \alpha_3],$ $\gamma'_2 = A_7 (s_{33}s_{44}\alpha_1 - s_{44}s_{13}\alpha_3),$ $\gamma'_6 = A_7 s_{14} (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3);$ $1/A_7 = s_{44}(s_{11}s_{33} - s_{13}^2) - s_{33}s_{14}^2.$
clasele 3 și $\bar{3}$	$X'_3 \parallel X_2 \perp (01\bar{1}0)$ $X'_1 \parallel X_1 \parallel [2\bar{1}10]$ $X'_2 \parallel X_3 \parallel [0001]$	$\gamma'_1 = A_8 s_{44} (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3),$ $\gamma'_2 = A_8 [-s_{44}s_{13}\alpha_1 + (s_{11}s_{44} - s_{25}^2) \alpha_3],$ $\gamma'_6 = A_8 s_{25} (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3);$ $1/A_8 = s_{44}(s_{11}s_{33} - s_{13}^2) - s_{33}s_{25}^2.$

clasele 32, 3m, $\bar{3}m$	$X'_3 \parallel X_2 \perp (01\bar{1}0)$ $X'_1 \parallel X_1 \parallel [2\bar{1}\bar{1}0]$	$\gamma'_1 = A_9 (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3), \quad \gamma'_2 = A_9 (-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3), \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
Sistemul hexagonal și texturile	$X'_3 \parallel X_3 \perp (0001)$	$\gamma'_1 = \gamma'_2 = \alpha_1/(s_{11} + s_{12}), \quad \gamma'_6 = 0.$
	$X'_3 \perp X_3$ $X'_1 \perp X_3, X'_2 \parallel X_3$	$\gamma'_1 = A_9 (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3), \quad \gamma'_2 = A_9 (-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3), \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
Sistemul tetragonal	$X'_3 \parallel X_3 \perp (001)$	$\gamma'_1 = \gamma'_2 = \alpha_1/(s_{11} + s_{12}), \quad \gamma'_6 = 0.$
	$X'_3 \parallel X_1 \perp (100)$ $X'_1 \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_9 (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_2), \quad \gamma'_2 = A_9 (-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3), \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
toate clasele	$X'_3 \perp (110)$ $X'_1 \parallel [1\bar{1}0]$ $X'_2 \parallel X_3 \parallel [001]$	$\gamma'_1 = 4A_{10} (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3), \quad \gamma'_2 = A_{10} [-4s_{13}\alpha_1 + (2s_{11} + 2s_{12} + s_{66}) \alpha_2], \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_{10} = s_{33} (2s_{11} + 2s_{12} + s_{66}) - 4s_{13}^2.$
clasele 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm	$X'_3 \perp (h0l)$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_{11} [h^2(c/a)^2 + l^2] [l^2(s_{11} - s_{12}) \alpha_1 + h^2(c/a)^2 (s_{11}\alpha_3 - s_{13}\alpha_1)],$ $\gamma'_2 = A_{11} \{l^4(s_{11} - s_{12}) \alpha_1 + h^4(c/a)^4 (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3) +$ $\quad + h^2l^2(c/a)^2 [(s_{13} + s_{44}) \alpha_1 - s_{12}\alpha_3]\}, \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_{11} = l^4(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h^4(c/a)^4 (s_{11}s_{33} - s_{13}^2) + h^2l^2(c/a)^2 (2s_{11}s_{13} - 2s_{12}s_{13} + s_{11}s_{44}).$
	$X'_3 \perp (hhl)$ $X'_2 \parallel [\bar{1}10]$	$\gamma'_1 = A_{12} [2h^2(c/a)^2 + l^2] \{l^2s_{66}\alpha_1 + h^2(c/a)^2 [(2s_{11} + 2s_{12} + s_{66}) \alpha_3 - 4s_{13}\alpha_1]\},$ $\gamma'_2 = A_{12} \{l^4s_{66}\alpha_1 + 8h^4(c/a)^4 (s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3) +$ $\quad + h^2l^2(c/a)^2 [4(s_{13} + s_{44}) \alpha_1 - (2s_{11} + 2s_{12} - s_{66}) \alpha_3]\}, \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_{12} = l^4s_{66} (s_{11} + s_{12}) + 2h^4(c/a)^4 (2s_{11}s_{33} + 2s_{12}s_{33} + s_{66}s_{33} - 4s_{13}^2) +$ $\quad + h^2l^2(c/a)^2 (4s_{66}s_{13} + 2s_{11}s_{44} + 2s_{12}s_{44} + s_{66}s_{44}).$

Sistemele și clasele	Orientările lamelelor și alegerea axelor X'_1 și X'_2	Coeficienții γ'_α
Sistemul cubic	$X'_3 \perp (001)$	$\gamma'_1 = \gamma'_2 = \alpha/(s_{11} + s_{12}), \quad \gamma'_6 = 0.$
	$X'_3 \perp (110)$ $X'_1 \parallel [110], X'_2 \parallel [001]$	$\gamma'_1 = 4A_{13}(s_{11} - s_{12}) \alpha, \quad \gamma'_2 = A_{13}(2s_{11} - 2s_{12} + s_{44}) \alpha, \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_{13} = s_{11}(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44}) - 4s_{12}^2.$
	$X'_3 \perp (111)$	$\gamma'_1 = \gamma'_2 = 6\alpha/(4s_{11} + 8s_{12} + s_{44}), \quad \gamma'_6 = 0.$
	$X'_3 \perp (h0l)$ $X'_1 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_{14}(h^2 + l^2)^2 (s_{11} - s_{12}) \alpha, \quad \gamma'_2 = A_{14}[(h^4 + l^4)(s_{11} - s_{12}) + h^2l^2s_{44}]\alpha, \quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_{14} = (h^4 + l^4)(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h^2l^2(2s_{11}s_{13} - 2s_{12}^2 + s_{11}s_{44}).$
	$X'_3 \perp (hhl)$ $X'_1 \parallel [\bar{1}10]$	$\gamma'_1 = A_{15}(2h^2 + l^2)[l^2s_{44} + h^2(2s_{11} - 2s_{12} + s_{44})]\alpha,$ $\gamma'_2 = A_{15}[l^4s_{44} + 8h^4(s_{11} - s_{12}) + h^2l^2(5s_{44} - 2s_{11} + 2s_{12})]\alpha, \quad \gamma'_6 = 0;$ $1/A_{15} = l^4(s_{11} + s_{12})s_{44} + 2h^4[(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44})s_{11} - 4s_{12}^2] +$ $+ h^2l^2(2s_{11} + 6s_{12} + s_{44})s_{44}.$
Corpurile izotrope		$\gamma'_1 = \gamma'_2 = \alpha/(s_{11} + s_{12}) = \alpha E/(1 - \nu), \quad \gamma'_6 = 0.$

Notațiile: α, c, β – parametrii rețelei cristaline, h, l – indicii Miller, E – modulul Young, ν – coeficientul lui Poisson.

§ 51), deosebindu-se însă ca valoare, dat fiind că coeficienții $d'_{\alpha\lambda}$ nu sînt egali cu coeficienții $c'_{\alpha\lambda}$. Cînd se utilizează acest tabel, trebuie avut în vedere faptul că coeficienții γ'_α sînt raportați la sistemul special de coordonate, $X'_1 X'_2 X'_3$, legat de lamelă; de aceea, ei sînt notați cu accent. Coeficienții $s_{\lambda\mu}$ și α_λ sînt raportați la un sistem de coordonate cristalofizic, ceea ce permite introducerea directă a valorilor lor tabelate în formulele scrise.

În general, relativ la termoelasticitatea corpurilor anizotrope trebuie consultată lucrarea lui Uzdalev (1957).

§ 56. UNDE ELASTICE ÎN CRISTALE

Propagarea undelor elastice (sonore și ultrasonore) prin cristale prezintă o serie de particularități, care o deosebesc de propagarea prin corpurile izotrope. Aceste deosebiri amintesc, într-o anumită măsură, de deosebirile existente între propagarea luminii în cristale și în corpurile izotrope.

O undă elastică plană (indiferent dacă este vorba despre cristal sau despre un mediu izotrop) este descrisă de vectorul de deplasare

$$u(\mathbf{r}, t) = A \mathbf{p} \exp (i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t), \quad (56.1)$$

A fiind amplitudinea undei, \mathbf{p} — vectorul polarizare, adică un vector unitar, care coincide ca direcție cu vectorul deplasare, $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{m}$ — vectorul de undă, v — viteza de fază, iar \mathbf{m} — vectorul unitar al normalei de undă. Deplasările reale sînt egale cu partea reală a acestei expresii complexe. Este convenabil ca expresia (56.1) să fie transcrisă în forma

$$u(\mathbf{r}, t) = A \mathbf{p} \exp [(2\pi i/\lambda) (\mathbf{m} \cdot \mathbf{r} - vt)]. \quad (56.2)$$

Cîmpul deplasărilor trebuie să satisfacă ecuațiile electrodinamicii

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2},$$

unde c_{ijkl} sînt coeficienții adiabatici de elasticitate ai cristalului, iar ρ — densitatea lui. Înlocuind expresia (56.2) în ecuația de mișcare și observînd că diferențierea în raport cu t a unor funcții exponențiale de forma (56.2) se reduce la înmulțirea cu $-(2\pi i/\lambda)v$, iar diferențierea în raport cu x_j , la înmulțirea cu $(2\pi i/\lambda)m_j$, obți-

nem ecuația fundamentală a teoriei undelor elastice din cristal, *ecuația lui Christoffel*

$$c_{ijkl} m_j m_k p_l = \rho v^2 p_i. \quad (56.3)$$

Plecînd de la faptul că tensorul c are simetrie internă, vom introduce *tensorul simetric al lui Christoffel*

$$M_{il} = c_{ijkl} m_j m_k, \quad \mathbf{M} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{m}. \quad (56.4)$$

Deoarece tensorul \mathbf{M} depinde nu numai de tensorul de material c , ci și de direcția de propagare a undei, el nu este un tensor de material și, deci, simetria sa exterioară poate lua și valori mai mici decît simetria cristalului (lista formulelor de definiție a tensorului Christoffel, pentru fiecare clasă de simetrie elastică, este dată în F. I. Fiodorov, 1965). Înlocuindu-l pe acesta în (56.3), obținem ecuațiile Christoffel în forma

$$M_{il} p_l = \rho v^2 p_i, \quad \mathbf{M} \cdot \mathbf{p} = \rho v^2 \mathbf{p}. \quad (56.5)$$

Deseori se folosește tensorul redus al coeficienților de elasticitate, $\lambda_{ijkl} = c_{ijkl}/\rho$, și tensorul lui Christoffel redus, $\Lambda_{il} = \lambda_{ijkl} m_j m_k$. Ecuațiile lui Christoffel capătă în acest caz forma

$$\Lambda_{il} p_l = v^2 p_i. \quad (56.5')$$

Ecuațiile lui Christoffel arată că vectorii de polarizare, \mathbf{p} , ai undelor elastice, care se propagă într-un cristal după o direcție \mathbf{m} , sînt vectori proprii ai tensorului lui Christoffel $\mathbf{M}(\mathbf{m})$ sau $\Lambda(\mathbf{m})$. Dacă tensorul Christoffel $\mathbf{M}(\mathbf{m})$ are trei valori proprii diferite, atunci, în direcția dată, \mathbf{m} , se pot propaga trei unde elastice izonormale, perpendiculare între ele, astfel încît viteza de fază, $v_{(k)}$, a fiecăreia dintre ele să fie determinată de valorile proprii $\rho v_{(k)}^2$, corespunzătoare vectorului propriu respectiv, $\mathbf{p}_{(k)}$ (pentru tensorul Christoffel redus, Λ_{il} , valorile proprii sînt egale cu pătratele vitezelor de fază, $v_{(k)}^2$). Faptul că printr-un cristal se pot propaga numai unde de o anumită polaritate strict determinată, înrudește acustica cristalelor cu optica cristalelor. Spre deosebire de undele electromagnetice, într-o anumită direcție \mathbf{m} se propagă trei unde elastice, nu două. Aceea dintre ele al cărei vector de polarizare

* Valorile proprii ale tensorilor Christoffel sînt pozitive pentru orice \mathbf{m} ; aceasta este o consecință a inegalităților pe care le satisface tensorul c ; v. §63. Demonstrația faptului că valorile proprii ale tensorului Christoffel sînt pozitive este dată în lucrarea lui Fiodorov, 1965.

face cel mai mic unghi cu vectorul normalei de undă se numește *undă cvasilongitudinală*, iar celelalte două, *unde cvasitransversale*. Se poate întâmpla ca vectorul de polarizare al uneia dintre cele trei unde să coincidă cu vectorul normalei de undă; atunci această undă va fi longitudinală, celelalte două unde fiind obligatoriu transversale. O asemenea direcție \mathbf{m} se numește *normală longitudinală*. Se poate întâmpla și ca numai una dintre cele trei unde să fie transversală; în acest caz, unghiul dintre vectorul de polarizare al undei cvasilongitudinale și normala de undă este egal cu unghiul dintre vectorul de polarizare al undei cvasitransversale și planul frontului de undă. În acest caz, \mathbf{m} este *normala transversală*.

Dacă două valori proprii ale tensorului $\mathbf{M}(\mathbf{m})$ coincid, atunci după direcția \mathbf{m} se pot propaga o undă cvasilongitudinală având vectorul de polarizare $\mathbf{p}_{(0)}$, a cărei viteză de fază, $v_{(0)}$, este determinată de valoarea proprie simplă, $\rho v_{(0)}^2$, precum și o mulțime de unde cvasitransversale având vitezele aceleași, egale cu $v_{(1)}$, ale căror vectori de polarizare pot lua orice direcție posibilă, perpendiculară pe $\mathbf{p}_{(0)}$. Una dintre aceste unde este pur transversală; vectorul ei de polarizare este $\mathbf{p}_{(1)} \parallel (\mathbf{p}_{(0)} \times \mathbf{m})$. Direcția \mathbf{m} se numește, în acest caz, *axă acustică*. Dacă \mathbf{m} va fi totodată și o normală longitudinală, adică $\mathbf{p}_{(0)} = \mathbf{m}$, atunci toate undele, polarizate perpendicular pe $\mathbf{p}_{(0)}$, vor fi transversale, direcția fiind denumită *axă acustică longitudinală* (v. Hatkevici, 1962).

Pentru calcularea vitezei de fază a unei unde elastice, trebuie găsită valoarea proprie corespunzătoare a tensorului Christoffel. Această metodă laborioasă este inevitabilă însă numai în cazul în care direcția vectorului de polarizare, \mathbf{p} , nu este cunoscută. Dacă se cunoaște această direcție, atunci viteza undei se calculează imediat după formula

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} \mathbf{p} \mathbf{m} : \mathbf{c} : \mathbf{m} \mathbf{p}} = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl} p_i m_j m_k p_l}, \quad (56.6)$$

pe care o putem transcrie într-o formă mai comodă pentru calcule

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{\lambda\mu} L_\lambda L_\mu}, \quad (56.7)$$

unde

$$L_\lambda = \begin{cases} p_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ p_i m_j + m_i p_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases}$$

În particular, viteza de fază a undei longitudinale este

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{\lambda\mu} N_\lambda N_\mu}, \quad (56.8)$$



unde

$$N_{\lambda} = \begin{cases} m_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2 m_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases}$$

Deducerea formulelor (56.7) și (56.8) este dată în anexa F. Menționăm că pentru utilizarea formulei (56.7) trebuie să ne asigurăm că vectorii \mathbf{m} și \mathbf{p} dați pot servi drept normală de undă și, respectiv, vector de polarizare al aceleiași unde elastice. Analog, formula (56.8) poate fi utilizată numai în cazul în care ne-am convins că \mathbf{m} este normala longitudinală a cristalului considerat.

Cînd o undă elastică se propagă printr-un mediu anizotrop, în general, fluxul de energie deviază față de normala la undă.

Viteza și direcția fluxului de energie sînt determinate de vectorul *viteză radială* sau viteză de grup

$$\omega = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad \omega_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i}. \quad (56.9)$$

Pentru a stabili legătura dintre viteza radială și celelalte caracteristici ale undei elastice, înmulțim scalar ambele părți ale ecuației Christoffel, (56.3), cu vectorul de polarizare, \mathbf{p} . Obținem egalitatea

$$c_{ijkl} p_i m_j m_k p_l = \rho v^2, \quad \mathbf{pm} : \mathbf{c} : \mathbf{mp} = \rho v^2. \quad (56.10)$$

Înmulțind ambii membri ai acesteia cu $4\pi^2/\lambda^2$, se poate aduce egalitatea sub forma

$$c_{ijkl} p_i k_j k_l p_m = \rho \omega^2, \quad \mathbf{pk} : \mathbf{c} : \mathbf{kp} = \rho \omega^2. \quad (56.11)$$

Diferențiind (56.11) în raport cu \mathbf{k} , obținem

$$\mathbf{c} : \mathbf{kp} + \mathbf{pk} : \mathbf{c} \cdot \mathbf{p} = 2\rho\omega \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}.$$

De aici, folosind formula (56.9) și simetria interioară a tensorului \mathbf{c} , găsim viteza radială

$$w_j = \frac{1}{\rho\omega} c_{ijkl} p_i p_m k_l, \quad \omega = \frac{1}{\rho\omega} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{p}) \cdot \mathbf{k};$$

pe care este mai comod să o exprimăm în funcție de v și \mathbf{m}

$$w_j = \frac{1}{\rho v} c_{ijkl} p_i p_l m_k, \quad \omega = \frac{1}{\rho v} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{p}) \cdot \mathbf{m}. \quad (56.12)$$

Tensorul simetric de rangul doi,

$$P_{jk} = c_{ij\alpha l} p_i p_l, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{p}, \quad (56.13)$$

se numește cel de al doilea tensor al lui Christoffel. Înlocuindu-l în (56.12), obținem

$$w_j = \frac{1}{\rho v} P_{jk} m_k, \quad \omega = \frac{1}{\rho v} \mathbf{P} \cdot \mathbf{m}. \quad (56.14)$$

Dacă direcția vitezei radiale a unei unde elastice coincide cu normala de undă, vom numi această undă (prin analogie cu optica cristalelor) undă *ordinară*, iar dacă direcția vitezei nu coincide cu normala, vom numi unda *extraordinară*. Din ecuația (56.14) reiese clar că o undă elastică este ordinară numai în cazul în care vectorul normalei de undă, \mathbf{m} , este un vector propriu al celui de al doilea tensor al lui Christoffel, \mathbf{P} . Toate undele longitudinale sînt, în particular, unde ordinare. Într-adevăr, în cazul unei unde longitudinale, \mathbf{m} este vectorul polarizării și de aceea este vector propriu al primului tensor Christoffel, \mathbf{M} ; tot din aceeași cauză însă pentru unda longitudinală ambii tensori Christoffel coincid, deci \mathbf{m} este vector propriu și al celui de al doilea tensor Christoffel, \mathbf{P} .

Geometric, este evident că proiecția vectorului viteză radială pe direcția normalei de undă este egală cu viteza de fază. Această concluzie nu este greu de dedus analitic. Înmulțind scalar ambii membri ai relației (56.12) cu vectorul unitar al normalei undei, \mathbf{n} , și avînd în vedere (56.10), obținem

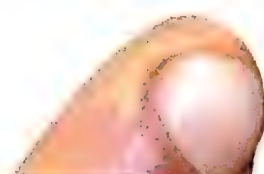
$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{m} = v. \quad (56.15)$$

Așadar, viteza radială este egală cu viteza de fază numai în cazul undei ordinare; în cazul undei extraordinare viteza radială depășește viteza de fază și aceasta cu atît mai mult cu cît direcția fluxului de energie se abate mai tare de la normala de undă. Unghiul ψ dintre direcția fluxului de energie și normala undei este dat de relația

$$\cos \psi = \mathbf{m} \cdot \mathbf{s}, \quad (56.16)$$

unde $\mathbf{s} = \mathbf{w}/w$ este vectorul unitar al razei. Din ecuația (56.14) îl scoatem pe \mathbf{w}/w și, înmulțind scalar cu \mathbf{m} , obținem

$$\cos \psi = \frac{\mathbf{m} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{m}}{\sqrt{\mathbf{m} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{m}}} = \frac{\rho v^2}{\sqrt{P_{ij} P_{ik} m_j m_k}}. \quad (56.17)$$



Trebuie avut în vedere că deviația razei de la normala de undă atinge uneori zeci de grade (v., de exemplu, figurile 56.6, 56.11, 56.14, 56.16), încât omiterea sa este inadmisibilă. În general, în acustica cristalelor anizotropia cristalelor se manifestă mult mai pregnant decât în cadrul opticii cristalelor, mai ales în domeniul luminii vizibile (în domeniul infraroșu anizotropia proprietăților optice ale cristalelor apare ceva mai evident).

După o direcție \mathbf{m} , care nu este axă acustică, se pot propaga trei unde polarizate reciproc perpendicular, având vectorii de polarizare $\mathbf{p}_{(0)}$, $\mathbf{p}_{(1)}$, $\mathbf{p}_{(2)}$ și vitezele de fază $v_{(0)}$, $v_{(1)}$, $v_{(2)}$. Fiecăreia dintre ele îi corespunde un vector viteză radială,

$$w_{(i)} = (\rho v_{(i)})^{-1} \mathbf{P}_{(i)} \cdot \mathbf{m}.$$

În direcția axei acustice se pot propaga însă, în afară de undele cvasilongitudinale, $\{\mathbf{m}, \mathbf{p}_{(0)}\}$, și mulțimea undelor cvasitransversale, $\{\mathbf{m}, \mathbf{p}_{(\varphi)}\}$, φ fiind unghiul măsurat de la o anumită direcție, în planul propriu al tensorului \mathbf{M} . Acestea le corespund mulțimea de raze

$$w_{(\varphi)} = \frac{1}{\rho v_{(1)}} \mathbf{P}_{(\varphi)} \cdot \mathbf{m}. \quad (56.18)$$

Aceste raze formează, evident, un con, iar întregul tablou reprezintă analogul acustic al cunoscutului fenomen de *refracție conică interioară*, din optica cristalelor (v. § 39) (amănunte, despre refracția conică interioară se găsesc în Hatkevici, 1962, a, în Aleksandrov și Rîjova, 1964, și în Viswanathan, 1969).

Să examinăm, de exemplu, o undă elastică ce se propagă într-un cristal al sistemului trigonal, după axa principală de simetrie, $\mathbf{m} = \mathbf{e}_3$, a acestuia. Atunci tensorul Christoffel este $M_{il} = c_{i33l}$, ceea ce, pentru cristalele din sistemul trigonal, dă (v. tab. E.18)

$$\|M_{il}\| = \begin{vmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{vmatrix}.$$

Acest tensor posedă o valoare proprie simplă, c_{33} , care corespunde vectorului propriu

$$\mathbf{p}_{(0)} = \mathbf{e}_3 = \mathbf{m},$$

adică unei unde longitudinale, care se propagă cu viteza

$$v_{(0)} = \sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}},$$

și o valoare proprie dublă, c_{44} , care corespunde mulțimii vectorilor proprii

$$\mathbf{p}_{(\varphi)} = \mathbf{e}_1 \cos \varphi + \mathbf{e}_2 \sin \varphi,$$

adică tuturor undelor transversale posibile ($\mathbf{p}_{(\varphi)} \perp \mathbf{m}$), care se propagă cu viteza

$$v_{(1)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}.$$

Fiecăreia dintre aceste unde îi corespunde câte un al doilea vector Christoffel, al său,

$$P_{il}^{(\varphi)} = c_{i11l} \cos^2 \varphi + c_{i22l} \sin^2 \varphi + (c_{i12l} + c_{i21l}) \sin \varphi \cos \varphi.$$

Ținând cont de forma tensorului c pentru un cristal din sistemul trigonal*, obținem

$$\|P_{il}^{(\varphi)}\| = \begin{vmatrix} c_{11} \cos^2 \varphi + c_{66} \sin^2 \varphi & (c_{11} - c_{66}) \cos \varphi \sin \varphi & 2c_{14} \sin \varphi \cos \varphi \\ (c_{11} - c_{66}) \cos \varphi \sin \varphi & c_{11} \sin^2 \varphi + c_{66} \cos^2 \varphi & c_{14}(\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi) \\ 2c_{14} \cos \varphi \sin \varphi & c_{14}(\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi) & c_{44} \end{vmatrix}.$$

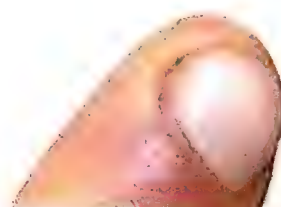
Din această cauză, fiecărei unde transversale, avînd vectorul de polarizare $\mathbf{p}_{(\varphi)}$, îi corespunde viteza sa radială

$$w_{(\varphi)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left[\mathbf{e}_3 + \frac{c_{14}}{c_{44}} (\mathbf{e}_1 \sin 2\varphi + \mathbf{e}_2 \cos 2\varphi) \right].$$

Prin urmare, fiecare rază face cu direcția normalei de undă, $\mathbf{m} = \mathbf{e}_3$, un unghi

$$\psi = \arctg \frac{c_{14}}{c_{44}},$$

* Aici, cu ajutorul relației $c_{11} - c_{12} = 2c_{66}$, s-a eliminat $c_{12} = c_{11} - 2c_{66}$. Se presupune că $c_{25} = 0$; pentru cristalele din sistemul superior aceasta are loc deja într-un sistem de coordonate cristalofizic, iar pentru subsistemul inferior — într-un sistem de coordonate special (v. § 52).



iar toate împreună dau naștere unui con circular. Reprezentând simultan polarizarea pentru direcția fiecărei raze, obținem distribuția polarizării în raport cu conul, arătată în figura 56.1.

Direcțiile $\langle 111 \rangle$ din cristalele sistemului cubic sînt axe de simetrie de ordinul trei, în jurul lor producîndu-se, de asemenea, o

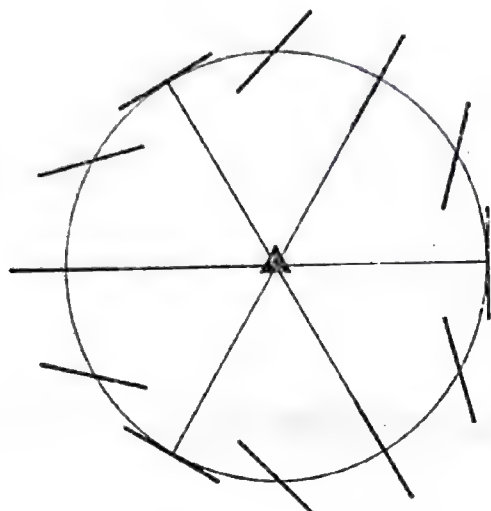


Fig. 56.1. Distribuția direcțiilor de polarizare în cadrul refracției conice în jurul axei de simetrie de ordinul trei. Sînt trasate planurile de simetrie. Axele de ordinul doi trebuie să fie reprezentate sub planul desenului (aceasta nu este o proiecție stereografică).

refracție conică a undelor polarizate transversal. Deviația razelor de la normala de undă este, în acest caz, egală cu

$$\psi = \arctg \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{44}}{\sqrt{2}(c_{11} - c_{12} + c_{44})}.$$

Refracția conică din acustica cristalelor, spre deosebire de cea din optica cristalelor, nu este un efect mic; iată unghiurile ψ pentru cîteva cristale:

Trigonale :	safir	cuarț	calcit
	$\psi = 9^{\circ}05'$	$17^{\circ}10'$	$30^{\circ}45'$
Cubice :	NaCl	siliciu	fluorit
	$\psi = 8^{\circ}40'$	$12^{\circ}40'$	$13^{\circ}40'$

În cazul în care undele elastice se propagă de-a lungul direcțiilor legate de elementele de simetrie elastică ale cristalului, undele pot fi longitudinale, transversale, ordinare etc. Studiul perspectivelor ce apar se bazează pe faptul că axele de simetrie ale tensorilor Christoffel, \mathbf{M} și \mathbf{P} , coincid cu vectorii lor proprii; vectorii proprii ai tensorului $\mathbf{M}(\mathbf{m})$ servesc, pe de altă parte, drept vectori de polarizare undelor elastice avînd normala \mathbf{m} , iar coincidența unuia dintre vectorii proprii ai tensorului $\mathbf{P}(\mathbf{p})$ cu normala de undă \mathbf{m} ne spune că unda $\{\mathbf{m}, \mathbf{p}\}$ este o undă ordinară.

Tensorul $\mathbf{M} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{m}$ este determinat de tensorul \mathbf{c} și diada \mathbf{mm} ; conform principiului Curie, printre elementele de simetrie ale acestui tensor trebuie obligatoriu să se afle și cele care sînt comune atît lui \mathbf{c} cît și lui \mathbf{mm} .

$$G(\mathbf{N}) \supseteq G(\mathbf{c}) \cap G(\mathbf{mm}). \quad (56.19)$$

Grupurile $G(\mathbf{c})$, adică grupurile simetriei elastice ale unui cristal, sînt enumerate în § 52; grupul de simetrie al diadei \mathbf{mm} este $G(\mathbf{mm}) = \infty/mm$, axa principală de simetrie coincidînd cu direcția \mathbf{m} . Pentru tensorul $\mathbf{P}(\mathbf{p})$, în mod analog, obținem

$$G(\mathbf{P}) \supseteq G(\mathbf{c}) \cap G(\mathbf{pp}). \quad (56.20)$$

Plecînd de la aceste relații, să trecem la analiza unor cazuri particulare.

1. Fie ca vectorul \mathbf{m} să coincidă cu una dintre axele de simetrie de ordinul $N > 2$. Atunci această axă este o axă de simetrie de același ordin și pentru tensorul \mathbf{M} . Însă, deoarece, conform teoremei lui Hermann, toate axele de ordin superior lui doi constituie pentru tensorii de rangul doi axe de ordin infinit, tensorul \mathbf{M} va avea simetria ∞/mm ; cele două valori proprii ale sale coincid; unul dintre vectorii săi proprii este orientat după axa ∞ (adică după direcția \mathbf{m}), ceilalți completînd planul perpendicular. De aici rezultă că toate axele de simetrie de ordinul $N > 2$ reprezintă axe acustice longitudinale ale cristalului. Undele elastice care se propagă de-a lungul lor sînt fie longitudinale, fie transversale, undele transversale putînd avea orice polarizare, iar vitezele tuturor acestor unde transversale sînt egale.

Conform regulii generale, undele longitudinale sînt unde ordinare, undele transversale necesitînd o examinare separată. La punctul 2 se demonstrează că undele transversale sînt unde ordinare, chiar și atunci cînd normala de undă este orientată după o axă de simetrie de ordinul doi. Este clar că acest lucru este, de asemenea, adevărat, atît pentru axa de ordinul șase (infinit) cît și pentru axa de ordinul patru. Deoarece orice direcție dintr-un corp izotrop poate fi luată drept axă ∞ , aceste proprietăți vor fi caracteristice tuturor undelor elastice în corpurile izotrope. Undele transversale care se propagă de-a lungul unei axe de simetrie de ordinul trei sînt unde extraordinare, așa cum s-a arătat mai sus.

2. Fie un vector \mathbf{m} orientat după una dintre axele de simetrie de ordinul doi ale tensorului \mathbf{c} . Această axă este o axă de simetrie de ordinul doi și pentru tensorul \mathbf{M} ; aceasta înseamnă că unul dintre vectorii săi proprii este orientat după ea, iar ceilalți doi sînt perpendiculari pe ea. Prin urmare, axele de simetrie de ordinul doi ale tensorului \mathbf{c} au rolul de normale longitudinale ale cris-

talului, fără a fi însă axele lui acustice. Simultan cu unda longitudinală, de-a lungul axei de ordinul doi se propagă două unde transversale, care au viteze de fază diferite și polarizări strict determinate, $p_{(1)} \perp m$ și $p_{(2)} \perp m$. Dacă tensorul c are pe lângă axa $2 \parallel m$ o axă de simetrie de ordin par, perpendiculară pe axa de ordinul doi, atunci unul dintre vectorii transversali de polarizare este orientat după această axă; în acest caz și direcția celui de al doilea vector de polarizare transversal va fi axă de ordinul doi pentru tensorul c . Dacă însă tensorul c nu are axe de simetrie de ordin par, perpendiculare pe $2 \parallel m$, direcția vectorilor transversali de polarizare este determinată de coeficienții de elasticitate ai cristalului; așa se întâmplă, de exemplu, în cristalele sistemelor trigonal și monoclinic.

Nu numai unda longitudinală, ci și ambele unde transversale sînt unde ordinare chiar și în cazul general, cînd în $G(c)$ nu intră axe de ordin par, perpendiculare pe axa $2 \parallel m$. Acest fapt se explică prin aceea că axa $2 \parallel m$ face parte din intersecția grupurilor $G(c) \cap G(p_{(1)} p_{(1)})$ și $G(c) \cap G(p_{(2)} p_{(2)})$ (fig. 56.2) și de aceea servește ca axă de ordinul doi și pentru tensorii $P(p_{(1)})$ și $P(p_{(2)})$.

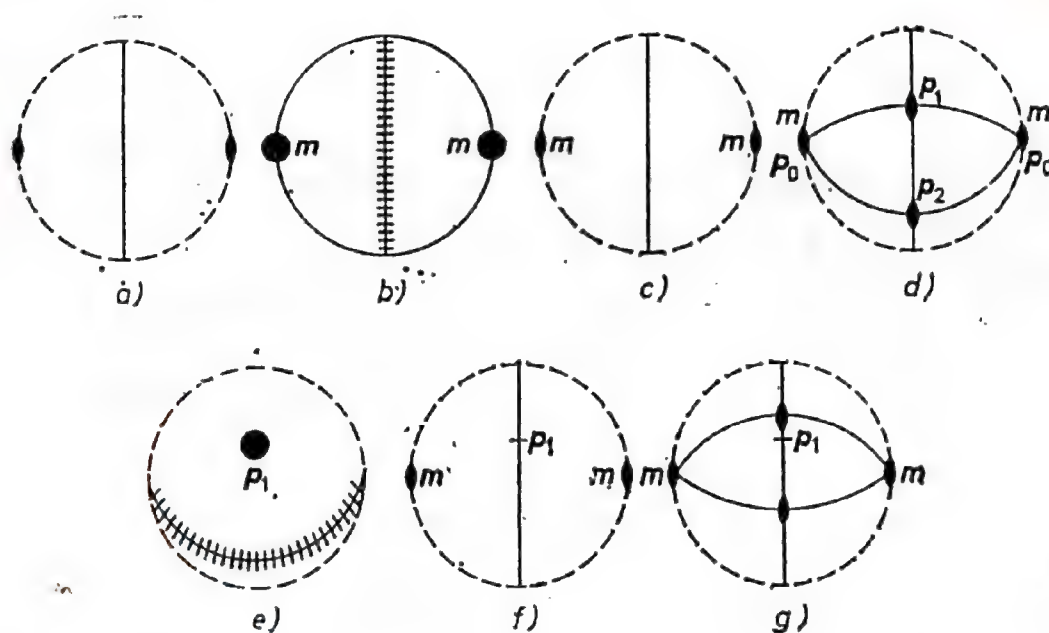


Fig. 56.2. Demonstrația practică a faptului că de-a lungul axelor de simetrie de ordinul doi se propagă o undă elastică longitudinală și două unde elastice transversale și a faptului că nu numai unda longitudinală, ci și cele transversale sînt unde ordinare. a) și b) Proiecțiile stereografice ale elementelor simetriei elastice, $G(c)$, și ale elementelor de simetrie ale diadei normalei de undă, $G(mm)$, ținîndu-se cont de poziția lor reciprocă; c) intersecția acestor grupuri; intersecția face parte din grupul $G(M)$ al tensorului M ; d) elementele de simetrie $G(M)$; după axe 2 sînt orientați vectorii polarizare, p_k , unul dintre ei (p_0) coincidînd cu m ; lui îi corespunde o undă longitudinală; e) elementele de simetrie $G(p_1 p_1)$; f) intersecția grupurilor $G(p_1 p_1)$ și $G(c)$; ea face parte din grupul $G(P_1)$; g) elementele de simetrie ale tensorului P_1 ; una dintre axe 2 coincide cu m , ceea ce arată că unda $[m, p_1]$ este o undă ordinară.

3. Fie vectorul m perpendicular pe axa de simetrie de ordinul doi a tensorului c , sau, ceea ce este același lucru, cuprins în unul dintre planurile lui de simetrie. Atunci, această axă de ordinul doi va fi totodată axă de ordinul doi și pentru diada mm și deci și pentru tensorul $M(m)$. Rezultă că unul dintre vectorii săi proprii coincide cu ea. Această axă fiind însă perpendiculară pe vectorul m , rezultă că vectorul propriu al tensorului M care este orientat după ea va fi totemai vectorul de polarizare al undei pur transversale. Ceilalți doi vectori de polarizare nu sînt, în general, nici longitudinali, nici transversali. Așadar, toate direcțiile perpendiculare pe axele de ordinul doi ale tensorului c , sau care se află în planul lui de simetrie, reprezintă normale, care sînt transversale. În acest caz nu există nici un motiv să ne așteptăm ca vreuna dintre unde (nici măcar cea transversală) să fie undă ordinară.

4. Pentru că axele de simetrie de ordinul șase (infini) și de ordinul patru sînt concomitent și axe de ordinul doi, direcțiile perpendiculare pe aceste axe sînt, de asemenea, normale transversale. Însă spre deosebire de direcțiile perpendiculare pe axele de simetrie de ordinul doi, direcțiile perpendiculare la axele de ordinul șase (infini) și ordinul patru mai au și alte proprietăți deosebite. Evident, este suficient să examinăm direcțiile care se află în planul (001) al unui cristal din sistemul tetragonal. Pentru aceste direcții, vectorul normalei de undă poate fi reprezentat sub forma

$$m = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi,$$

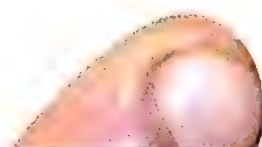
iar tensorul Christoffel capătă forma

$$M_{ii} = c_{i11i} \cos^2 \varphi + c_{i22i} \sin^2 \varphi + (c_{i12i} + c_{i21i}) \sin \varphi \cos \varphi.$$

Pentru cristalele sistemului tetragonal această dată

$$\|M_{ii}\| = \begin{vmatrix} c_{11} \cos^2 \varphi + c_{66} \sin^2 \varphi & (c_{12} + c_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & 0 \\ (c_{12} + c_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & c_{11} \sin^2 \varphi + c_{66} \cos^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \end{vmatrix}.$$

De aici se vede clar că atît direcția vectorului de polarizare a undei transversale, $p_{(1)} = e_3$, cît și viteza acestei unde, $v_{(1)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$, nu depind de direcțiile normalei de undă la planul (001), adică de unghiul φ . Prin urmare, planul (001), în cristalele sistemului tetragonal, este izotrop față de undele elastice polarizate perpendicular pe acest plan: ele se propagă toate cu aceeași viteză. În cristalele sistemului hexagonal aceeași proprietate o are planul



(0001), iar în cristalele din sistemul cubic — toate planurile de tipul $\{100\}$.

Al doilea tensor al lui Christoffel pentru astfel de unde, $P_{ii} = c_{i33i}$, capătă, pentru cristalele sistemului tetragonal, forma

$$\|P_{ii}\| = \begin{vmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{vmatrix}.$$

Coincidența celor două valori proprii ale sale arată că întregul plan X_1X_2 , adică (001), este un plan propriu pentru el. Astfel, pentru orice direcție a vectorului m într-un plan izotrop, al doilea tensor al lui Christoffel este un vector propriu al tensorului P și deci undele care se propagă într-un plan izotrop fiind polarizate perpendicular pe el, vor fi unde ordinare.

Aceste proprietăți ale undelor elastice ce se propagă în planuri izotrope sînt folosite la fabricarea conductorilor de sunet monocristalini pentru liniile ultrasonore de întârziere, adică a dispozitivelor pentru acumularea semnalelor ultrasonore. Destinația liniei de întârziere constă în conservarea semnalelor obținute de la un impuls, pentru compararea cu semnalele ulterioare. În conductorii de sunet monocristalini se utilizează principiul reflexiei multiple. Conductorul de sunet monocristalin al unei linii ultrasonore de întârziere este o prismă poliedrică ale cărei baze superioară și inferioară sînt paralele cu planul izotrop al cristalului. Direcția vibrațiilor mecanice este perpendiculară la planul de propagare a undei, fiind determinată de un transformator piezomixer. Fețele laterale ale prisme, în afară de două, reflectă unda ultrasonoră. Cele două fețe pe care se fixează mixerele nu participă la reflexie. Acestea sînt fețele emițătoare și receptoare.

Mersul unei raze prin conductorul de sunet este dat în figura 56.3. Unda de forfecare avînd vectorul de deplasare paralel cu fața reflectoare a conductorului de sunet nu se transformă în nici un alt fel de tip de undă, oricare ar fi unghiul de

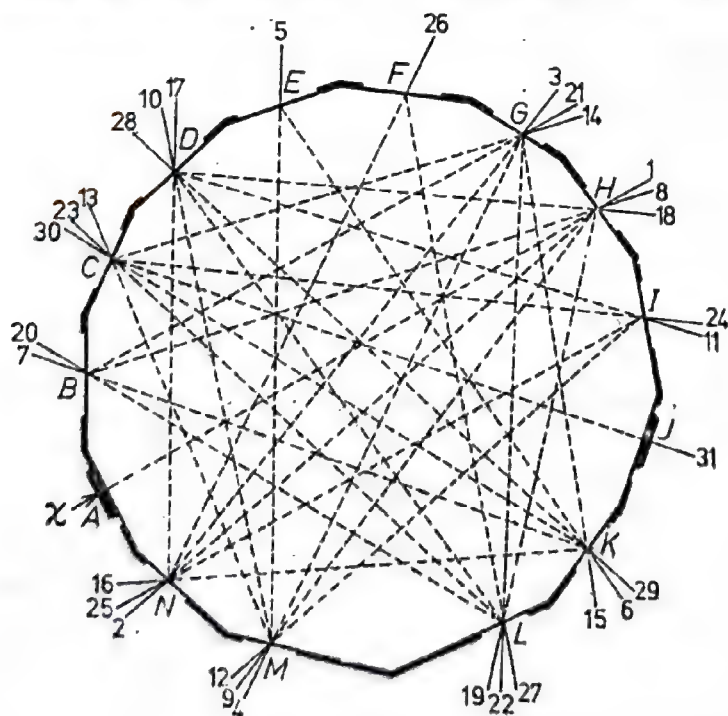


Fig. 56.3. Mersul razelor într-un conductor de sunete al unei linii ultrasonore de întârziere.

incidență pe o față și se reflectă, astfel încît unghiul de incidență să fie egal cu unghiul de reflexie. Rezultă deci că traiectoria razei prin conductorul de sunet poate fi calculată cu ajutorul legilor opticii geometrice. Timpul de întîrziere al conductorului de sunet este $\tau = l/v$, unde l este lungimea traiectoriei fasciculului, v fiind viteza undei în material. Pentru mărirea timpului de întîrziere, se aleg materiale cu viteze ale sunetului relativ mici, de o importanță esențială fiind elaborarea unor configurații cu l cît mai mare. Deoarece mărirea traiectoriei prin creșterea numai a dimensiunilor conductorului nu este convenabilă, iar micșorarea fețelor reflectoare provoacă amplificarea semnalelor parazite, pentru mărirea lui l se caută creșterea coeficientului de umplere a conductorului de sunet, $h = l/r$, r fiind dimensiunea maximă a conductorului de sunet. Acest parametru, care depinde de forma și dimensiunile conductorului de sunet, caracterizează densitatea umplerii lui cu unda ultrasonoră: cu cît este mai mare h , cu atît se poate obține un timp de întîrziere mai mare, pentru un gabarit dat al conductorului de sunet.

Mai sus au fost studiate toate cazurile în care o anumită direcție din cristal este fie normală longitudinală, fie normală transversală, fie axă acustică, ca urmare a poziției sale particulare față de elementele de simetrie ale tensorului coeficienților de elasticitate, c . Totuși, această poziție particulară față de elementele de simetrie ale tensorului c , care este o condiție suficientă, nu este nici pe departe și necesară, pentru ca direcția dată să reprezinte o normală longitudinală sau transversală sau să fie axă acustică. În realitate, normale longitudinale, așa cum a arătat F.I. Fiodorov (1965), există în orice cristal, oricare ar fi simetria sa. Demonstrația se bazează pe faptul că dacă vectorul m reprezintă o normală longitudinală el va fi vector propriu al tensorului M , adică satisface ecuația

$$m \cdot c : mm = \rho v^2 m, \quad c_{ijkl} m_j m_k m_l = \rho v^2 m_i. \quad (56.21)$$

Să examinăm acum funcția

$$F(m) = mm : c : mm = c_{ijkl} m_i m_j m_k m_l, \quad (56.22)$$

în care m este vectorul unitar

$$f(m) = 2(m \cdot m - 1) = 2(m_i m_i - 1) = 0. \quad (56.23)$$

Funcția $F(m)$ este definită pe suprafața sferei $m \cdot m = 1$ și, ca orice funcție continuă, definită pe o mulțime închisă, atinge, pe această mulțime, valoarea sa cea mai mare și valoarea cea mai mică. Pentru valorile corespunzătoare ale lui m sînt satisfăcute ecuațiile extremului condițional, sub forma lui Lagrange

$$\frac{\partial}{\partial m} (F - \lambda f) = 0, \quad (56.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial m_i} (F - \lambda f) = 0.$$

Substituind funcțiile F și f , definite cu formulele (56.22) și (56.23), în (56.24) vom obține exact ecuațiile normalei longitudinale, (56.21); multiplicatorul lui Lagrange, λ , nedeterminat, este egal cu ρv^2 . Prin urmare, în orice cristal există cel puțin două normale longitudinale: una dintre ele corespunde celei mai mari valori a lui F , iar cealaltă celei mai mici valori a lui F . În figura 56.4 este

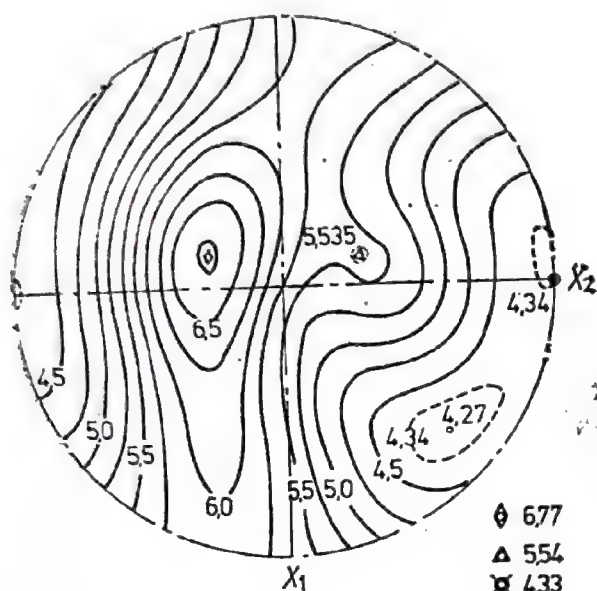


Fig. 56.4. Proiecția stereografică a liniilor de nivel ale funcției $F(\mathbf{m}) = c_{ijkl} m_i m_j m_k m_l$, pentru un cristal triclinic de sulfat de cupru, în 10^{-3} N/m^2 (v. tabelul 52.2). În direcțiile care corespund punctelor staționare ale acestei funcții, se propagă unde longitudinale.

reprezentată această funcție pentru cristalul triclinic al sulfatului de cupru, punctelor staționare corespunzându-le normalele longitudinale.

Pentru a ne da seama dacă într-un cristal oarecare există măcar o singură axă acustică, este necesară cunoașterea în prealabil a *suprafeței vitezelor de fază*. Aceasta este formată din vîrfurile tuturor vectorilor posibili ai vitezelor de fază, $\mathbf{v} = v\mathbf{m}$, duși dintr-un același punct — centrul suprafeței. Ecuația acestei suprafețe

$$\det \| c_{ijkl} v_j v_k - \rho v^4 \delta_{il} \| = 0 \quad (56.25)$$

se obține din condiția de existență a soluțiilor nenule ale ecuațiilor Christoffel, (56.3). Deoarece (56.25) este o ecuație de gradul 12, ea descrie o suprafață de ordinul 12 (în unele cazuri particulare, gradul ecuației (56.25) și, respectiv, ordinul suprafeței vitezelor de fază poate fi cu mult mai mic). Deoarece fiecărei direcții \mathbf{m} îi corespund, în general, trei valori ale lui v , suprafața are trei pînze. Se pot găsi însă și astfel de direcții \mathbf{m} , după care două dintre cele trei valori ale lui v să coincidă, ceea ce face ca două pînze ale suprafeței vitezelor de fază să aibă un punct comun; aceste direcții vor fi tocmai axele optice. Cea mai răspîdită, și pînă

nu de mult și singura configurație cunoscută a suprafeței vitezelor de fază, pentru care pînza exterioară reprezintă o undă cvasilongitudinală, cuprinzînd totodată două pînze ale undelor transversale, fără a se atinge de ele, este reprezentată în figurile 56.5, *a*, 56.7, *a*, 56.9, *a* și *d*, 56.10, *a*, 56.12, 56.13. În toate figurile acestea pînzele undelor cvasitransversale au puncte comune care corespund axelor

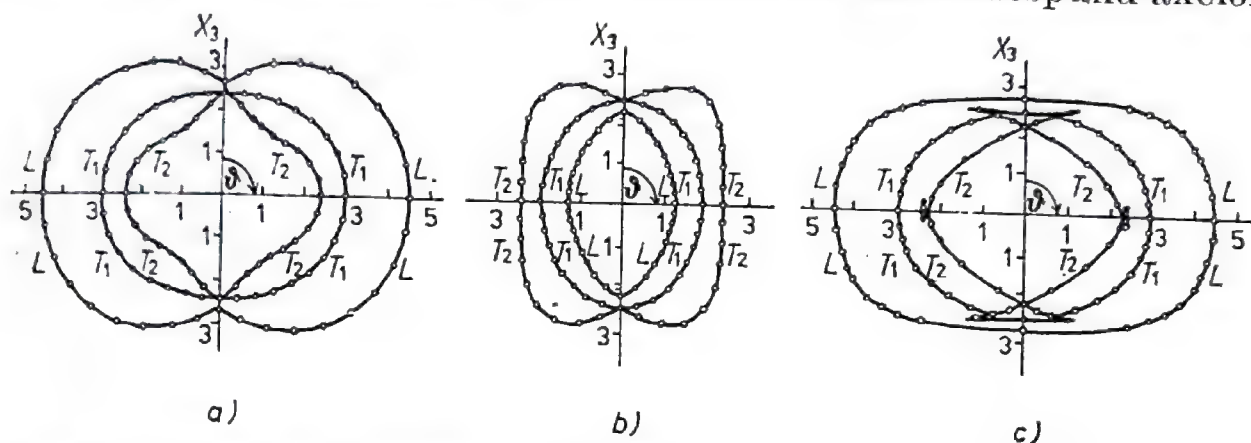


Fig. 56.5. Suprafețele vitezelor de fază (*a*), ale vitezelor inverse, înmulțite cu c_{44}/ρ (*b*) și ale vitezelor radiative (*c*) pentru cristalul de zinc, clasa 6/*mmm*. Secțiuni cu planuri ce trec prin axa principală de simetrie. *L* — unde cvasilongitudinale, *T*₁ — unde transversale, *T*₂ — unde cvasitransversale; în km/s (Musgrave, 1954).

acustice. În majoritatea cazurilor, acestea sînt direcții izolate: în cazul cristalelor hexagonale și trigonale direcția $\langle 0001 \rangle$, în cazul cristalelor cubice — direcțiile $\langle 100 \rangle$ și $\langle 111 \rangle$. În cristalul de beriliu însă există un întreg con de axe acustice (intersecțiile lui cu planul secțiunii sînt notate în figura 56.7 cu literele *D*).

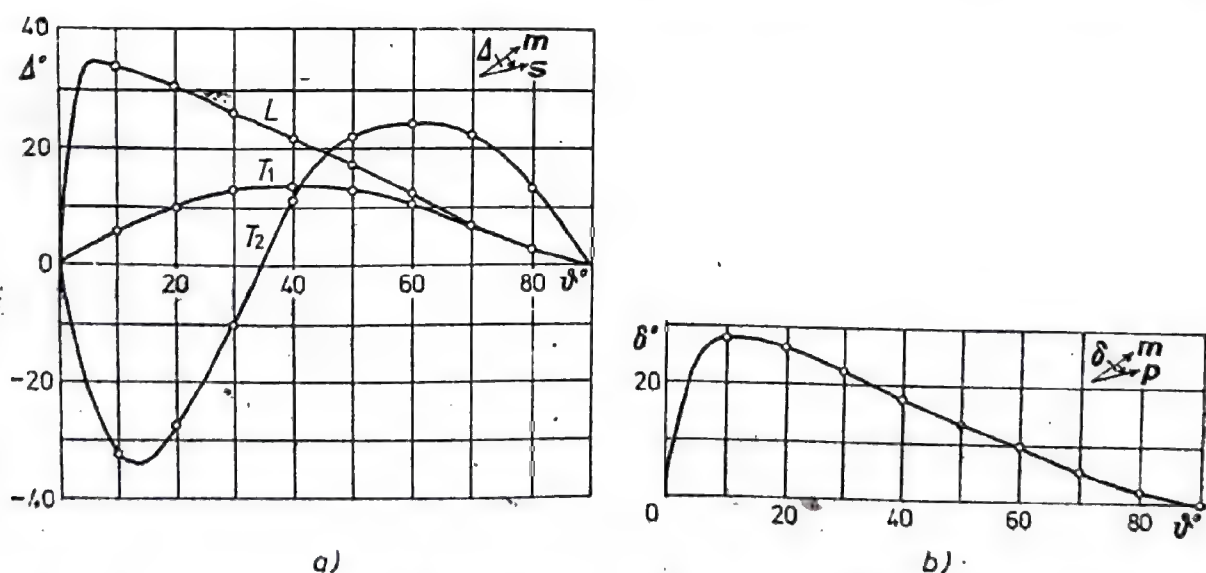


Fig. 56.6. Unghiul de deviație al razelor (*a*) și al vectorului polarizare al unei noi unde cvasilongitudinale (*b*) față de direcția normalei de undă într-un cristal de zinc. Unghiul θ se măsoară de la $[0001]$ către (0001) ; unghiul Δ și unghiul δ către (0001) ; se consideră pozitive în cazul deviației către (0001) . Pentru *L*, *T*₁, *T*₂, v. figura 56.5 (Musgrave, 1954).

Faptul că cristalul, în cazul unei configurații de acest fel a suprafeței vitezelor de fază, independent de simetria sa, posedă cel puțin o axă acustică, rezultă dintr-o teoremă generală de topologie : dacă $V(\mathbf{m})$ este un câmp vectorial continuu, tangent la sfera $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1$, atunci există cel puțin o valoare $\mathbf{m} = \mathbf{m}_0$ astfel încât

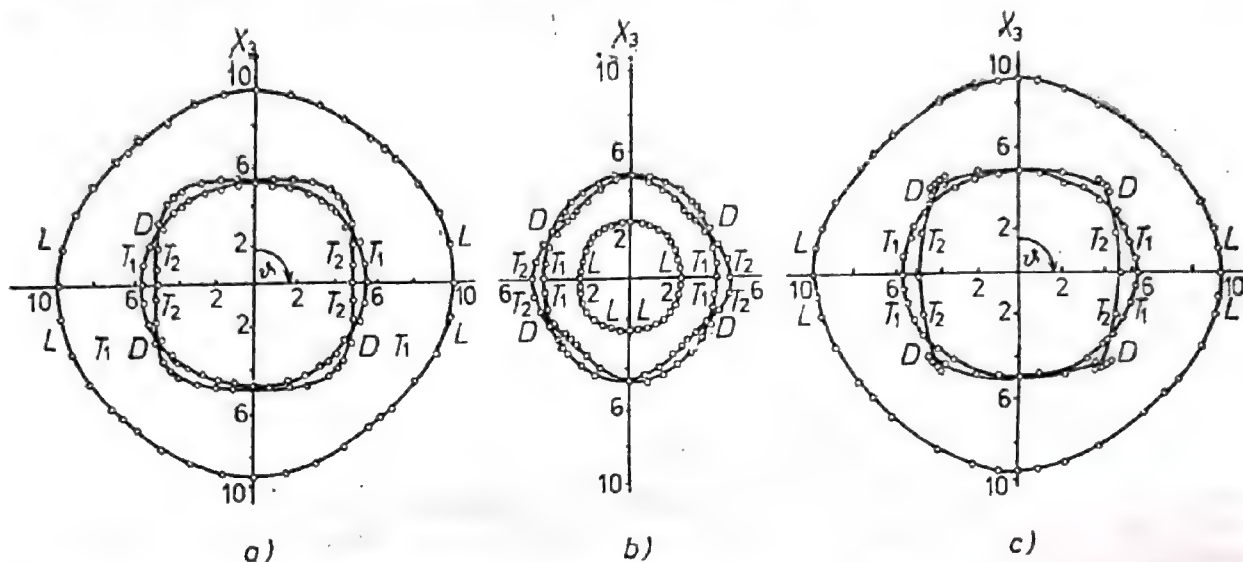


Fig. 56.7. Suprafețele vitezelor de fază (a), ale vitezelor inverse înmulțite cu c_{44}/ρ (b) și ale vitezelor radiative (c) pentru cristalul de beril, clasa $6/mmm$. Secțiuni cu planul care trece prin axa principală de simetrie. L — unde cvasilongitudinale, T_1 — unde transversale, T_2 — unde cvasitransversale ; în km/s (Musgrave, 1954).

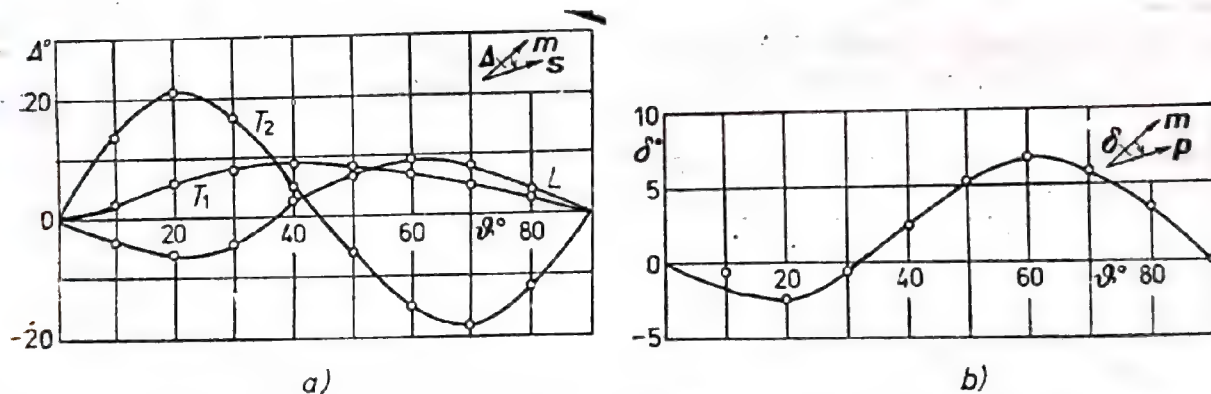


Fig. 56.8. Deviația razelor (a) și a vectorului polarizare al unei unde cvasilongitudinale (b) față de direcția normalei de undă într-un cristal de beril. Notațiile sînt cele din figura 56.5 (Musgrave, 1954).

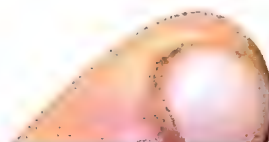
$V(\mathbf{m}_0) = 0$ (Steenrod și Tshinn, 1967). De fiecare punct al suprafeței vitezelor de fază, care nu se află pe axa acustică, este legat un vector unitar de polarizare al undei corespunzătoare : cvasilongitudinală — de punctele pînzei exterioare, și cvasitransversală — de punctele pînzei interioare. Să împărțim fiecare dintre aceste câmpuri vectoriale în două : câmpul $\mathbf{p}_{||}^{(k)}(\mathbf{m})$, al vectorilor care sînt fiecare în continuarea vectorului corespunzător, $\mathbf{v}^{(k)} = v_{(k)}\mathbf{m}$ și câmpul $\mathbf{p}_{\perp}^{(k)}(\mathbf{m})$ al vectorilor perpendiculari pe vectorii corespunzători, $\mathbf{v}^{(k)}$. Întrucît pînza exterioară nu se atinge de cele interioare,

ea este homeomorfă (echivalentă topologic) cu o sferă, astfel încît teorema topologică enunțată arată o dată în plus că cel puțin pentru o anumită valoare $m=m_0$, componenta tangențială a unei cvasilongitudinale, $p_{\perp}^{(0)}(m)$, se anulează și deci m_0 va fi o normală longitudinală a cristalului. Însă cîmpurile vectoriale $p_{\perp}^{(1,2)}(m)$, care se află pe pînzele interioare ale suprafeței vitezelor de fază, sînt diferite de zero peste tot. De aici rezultă că aceste pînze nu pot fi separate una de cealaltă, deoarece ele ar fi în acest caz sfere homeomorfe și, deci, ar avea cel puțin un singur punct comun. Raza vectoare a acestui punct va fi o axă acoustică. Așadar, am demonstrat că pentru o configurație a suprafeței vitezelor de fază ca cea dată, orice cristal are cel puțin o axă acoustică*.

Exemplul paratelorului (TeO_2) arată că sînt totuși posibile și alte configurații ale suprafeței vitezelor de fază. În figura 56.15, *b* se poate vedea punctul de contact al pînzelor exterioare ale acestei suprafețe; el corespunde direcției care se află în planul (010) și face cu [100] un unghi de $19,7^\circ$. Figura 56.16, *a* arată că în această direcție are loc o variație bruscă a deviației razei de la direcția normalei de undă. În ciuda acestui fapt, în interiorul unui con circumscris direcției [100] — în planul (010), el se află față de [100] la distanța de $19,7^\circ$, iar în planul (001) la $8,2^\circ$ — pînza exterioară a suprafeței vitezelor de fază corespunde undelor cvasitransversale și abia următoarea, unei cvasilongitudinale. Aceasta se vede din graficele devierii vectorilor de polarizare de la normala de undă, din figura 56.16, *b*. Se constată că în planul (001) în care unda cvasilongitudinală devine undă cvasitransversală (acesta este desenat punctat) nu se observă nici o particularitate.

Să revenim la problema existenței axelor acustice în cazul unui cristal cu simetrie oarecare. Conform teoremei anulării cîmpului vectorial continuu, tangent la sferă, orice pînză a suprafeței vitezelor de fază poate să nu aibă puncte comune cu alte pînze numai atunci cînd un punct oarecare al ei corespunde unei unde pur longitudinale (și deci o anumită vecinătate a acestui punct cu undele cvasitransversale). Pentru ca într-un cristal să nu existe nici o axă acoustică, este necesar și suficient ca suprafața vitezelor lui de fază să fie formată din trei pînze, nici una dintre ele neavînd puncte comune cu celelalte. Pentru aceasta este necesar (însă, firește, nu și suficient), la rîndul său, ca pe fiecare dintre aceste pînze să se găsească cel puțin un punct care să corespundă unei unde pur longitudinale. Așadar, analiza topologică nu exclude posibilitatea existenței unui cristal care să nu aibă nici o axă acoustică,

* Exact la fel se poate demonstra că orice cristal are cel puțin o axă optică. Diferența constă în faptul că ecuațiile suprafețelor optice sînt mai simple, iar direcțiile axelor optice se determină ușor din ele, în timp ce analiza analogă a ecuațiilor suprafețelor acustice este dificilă.



însă un asemenea cristal va trebui să aibă măcar trei normale longitudinale, unda longitudinală ce corespunde uneia dintre acestea trebuind să aibă viteza de fază mare, ca a undelor transversale izonormale ei, unda longitudinală corespunzătoare celei de a doua — mai mică, iar unda longitudinală ce corespunde celei de a treia — o viteză de fază intermediară vitezelor de fază ale undelor transversale izonormale cu ea. Trebuie însă să subliniem că analiza directă a ecuației suprafeței vitezelor de fază, (56.25), poate da rezultate mai precise (așa cum se întâmplă cu teorema lui F. I. Fiodorov, care demonstrează existența în orice cristal a cel puțin două normale longitudinale, în timp ce, din considerațiile topologice rezultă doar existența a cel puțin unei singure normale longitudinale).

Pentru studiul în continuare al suprafeței vitezelor și al altor suprafețe acustice ale unui cristal, vom reveni la definiția vitezei radiale, (56.9), separînd în cadrul ei dependența lui ω de lungimea k a vectorului de undă $\mathbf{k} = km$ și de direcția acestuia, \mathbf{m} (viteza radială)

$$\omega_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial k_i} + \frac{\partial \omega}{\partial m_j} \frac{\partial m_j}{\partial k_i}. \quad (56.26)$$

Să analizăm separat fiecare dintre derivatele care intră în descompunerea (56.26). Din relația $\omega = vk$ obținem

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = v \text{ și } \frac{\partial \omega}{\partial m_j} = k \frac{\partial v}{\partial m_j}.$$

Celelalte derivate sînt egale, respectiv, cu

$$\frac{\partial k}{\partial k_i} = \frac{\partial \sqrt{k_1 k_1}}{\partial k_i} = \frac{k_i}{k} = m_i,$$

$$\frac{\partial m_j}{\partial k_i} = \frac{\partial (k_j/k)}{\partial k_i} = \frac{1}{k^2} \left(k \frac{\partial k_j}{\partial k_i} - \frac{\partial k}{\partial k_i} k_j \right) = \frac{1}{k} (\delta_{ij} - m_i m_j).$$

Înlocuind aceste expresii în (56.26), obținem *

$$w_i = vm_i + (\delta_{ij} - m_i m_j) \frac{\partial}{\partial m_j}, \quad \mathbf{w} = v\mathbf{m} + (\mathbf{I} + \mathbf{m}\mathbf{m}) \cdot \frac{\partial v}{\partial \mathbf{m}}. \quad (56.27)$$

* Contradicția aparentă dintre formula (56.27) și formula găsită de F. I. Fiodorov (1965, p. 140), $\mathbf{w} = \partial v / \partial \mathbf{m}$, se explică prin faptul că în aceasta din urmă derivarea în raport cu \mathbf{m} se face fără a se ține cont de faptul că $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1$, iar în (56.27) se ține cont de această condiție.

Prin urmare, vectorul vitezei radiale, w , apare sub forma unei sume, unul dintre termeni fiind vectorul viteză de fază, $v = vm$, iar celălalt reprezintă partea derivatei $\partial v / \partial m$, perpendiculară pe normala de undă m (vezi § 18). Acest rezultat este în perfectă concordanță cu formula (56.15).

Din formula (56.27) rezultă că după direcțiile cărora le corespund puncte staționare ale suprafeței vitezelor (în acestea $\partial v / \partial m = 0$, adică raza vectoare este normală la suprafață), se vor propaga unde ordinare. Ea mai arată totodată că raza se abate față de normala de undă cu atât mai mult cu cât variația vitezei de fază, v , cu direcția este mai rapidă, abaterea făcându-se către direcția în care viteza crește. Prin urmare, vectorii vitezelor radiale „se concentrează” în direcțiile după care pînzele corespunzătoare ale suprafeței vitezelor sînt cel mai îndepărtate de centru.

Punctele staționare de pe suprafața vitezelor de fază a zincului (fig. 56.5, *a*) există nu numai la pol și pe ecuator, ci și între ele (pe pînza undelor evasitransversale, T_2). Figura 56.6 demonstrează că deviația razei respective față de direcția normalei de undă devine într-adevăr egală cu zero pentru 37° , astfel încît unda T_2 va fi după această direcție o undă ordinară. Pe suprafața vitezelor de fază a berilului (fig. 56.7, *a*) punctele staționare ce nu sînt în pol sau pe ecuator există nu numai pe pînza undelor evasitransversale (T_2), ci și pe pînza undelor evasilongitudinale (L), figura 56.8, *a* arătîndu-ne într-adevăr că deviația razelor L și T_2 se anulează pentru unghiurile corespunzătoare, așa cum cere teoria. Pe de altă parte, unda evasilongitudinală devenind pur longitudinală, devine totodată o undă ordinară, adică odată cu anularea deviației vectorului polarizării undei evasilongitudinale de la normala de undă devine zero și deviația razei față de normala de undă (graficele din figura 56.8, *a* și *b* sînt probabil trasate insuficient de exact, însă în figura 56.14 aceasta apare foarte pregnant).

În figurile ce reprezintă secțiunile suprafețelor vitezelor de fază ale cristalelor cubice cu planurile $\{001\}$ — figurile 56.9, *a* și 56.10, *a* — cercurile definesc planul $\{001\}$ ca fiind izotrop pentru undele transversale, polarizate perpendicular pe acest plan. Punctele staționare de pe secțiunile suprafețelor vitezelor de fază cu planurile $\{001\}$ (figurile 56.9, *a* și 56.10, *a*) și $\{1\bar{1}0\}$ (fig. 56.9, *d*) corespund undelor ordinare. Figurile arată că după direcțiile $\langle 001 \rangle$ și $\langle 110 \rangle$ sînt ordinare toate undele, după cum cere teoria, iar în direcțiile $\langle 111 \rangle$ sînt toate numai longitudinale. În secțiunea $\{1\bar{1}0\}$ se observă direcțiile care nu sînt definite prin simetria cristalului și după care se propagă, de asemenea, unde ordinare

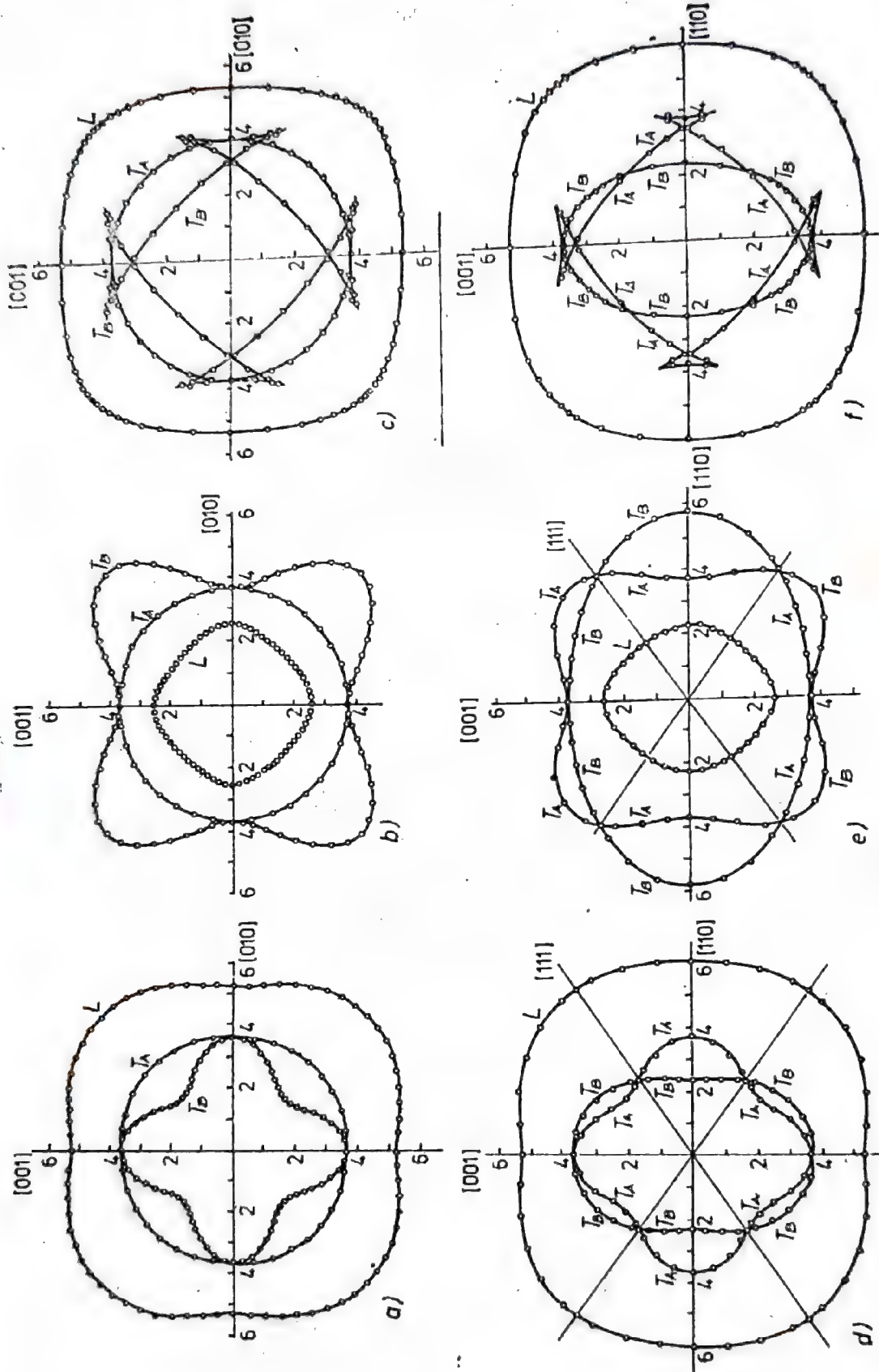


Fig. 56.9. Suprafețele vitezelor de fază (*a* și *d*), ale vitezelor inverse înmulțite cu c_{44}/ρ (*b* și *e*) și ale vitezelor radiative (*c* și *f*) pentru cristallul de nichel, clasa $m3m$; *a*, *b*, *c* — secțiunile cu planul (100); *d*, *e*, *f* — secțiunile cu planul (110); *L* — unde longitudinale; *T_A* — unde transversale, *T_B* — unde cvasitransversale; în km/s (Miller și Musgrave, 1956).

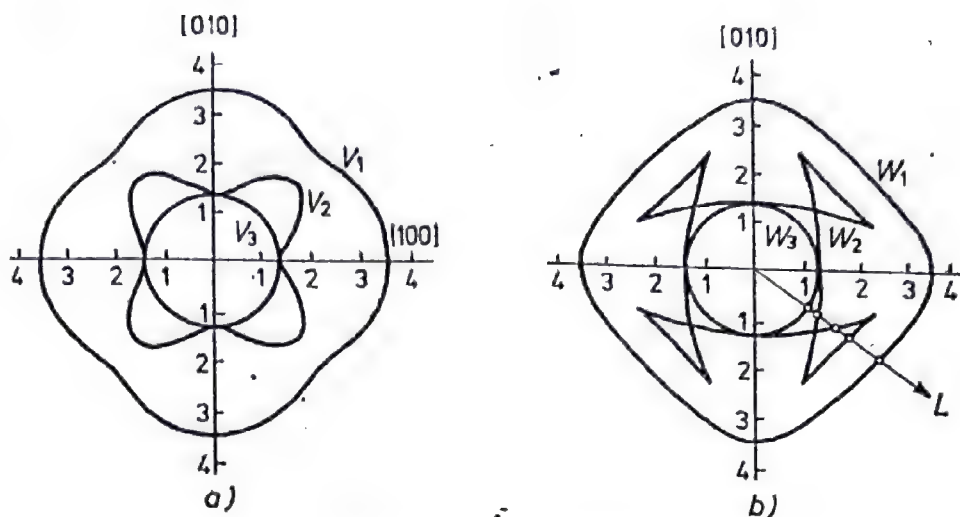


Fig. 56.10. Secțiunile suprafețelor vitezelor de fază (a) și ale vitezelor radiative (b) pentru cristalul de KBr, clasa $m3m$, cu planul (001). L — direcția razei căreia îi corespund cinci unde avînd normalele diferite (v. fig. 56.11); în km/s (Aleksandrov, 1958).

(transversale, $p \parallel \langle 110 \rangle$). Compararea figurilor 56.9, a și 56.10, a arată influența semnului anizotropiei (vezi § 52) asupra caracterului suprafeței vitezelor: în cazul cristalului de nichel coeficientul

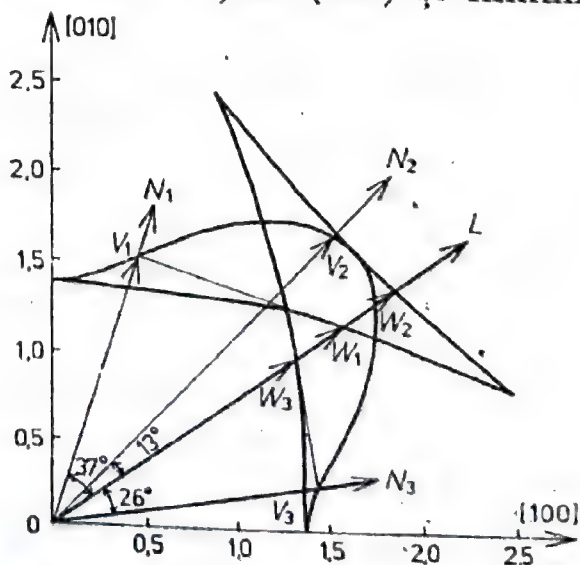
$$C_N^{(4)} = \frac{2}{5} (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) < 0$$

și corespunzător cu aceasta

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} > 1;$$

pentru cristalul de KBr $C_N^{(4)} > 0$ și $A < 1$. Pentru $C_N^{(4)} > 0$, viteza undelor longitudinale este maximă după direcțiile $\langle 100 \rangle$ și minimă

Fig. 56.11. Secțiunile suprafețelor vitezelor de fază și radiative pentru undele cvasitransversale care se propagă și care sînt polarizate în planul (001) pentru cristalul de KBr. L — direcția razei; w_1, w_2, w_3 — vitezele radiative pentru trei asemenea unde care se propagă după direcția L ; v_1, v_2, v_3 — vitezele lor de fază (normale); în km/s (Aleksandrov, 1958).



în direcțiile $\langle 111 \rangle$, iar pentru $C_N < 0$, viteza undelor longitudinale este minimă în direcțiile $\langle 100 \rangle$ și maximă după direcțiile $\langle 111 \rangle$; se pot găsi relativ ușor și alte regularități asemănătoare. În figurile 56.12 și 56.13 sînt reprezentate secțiunile suprafețelor vitezelor de fază a două cristale trigonale cu planurile de coordonate,

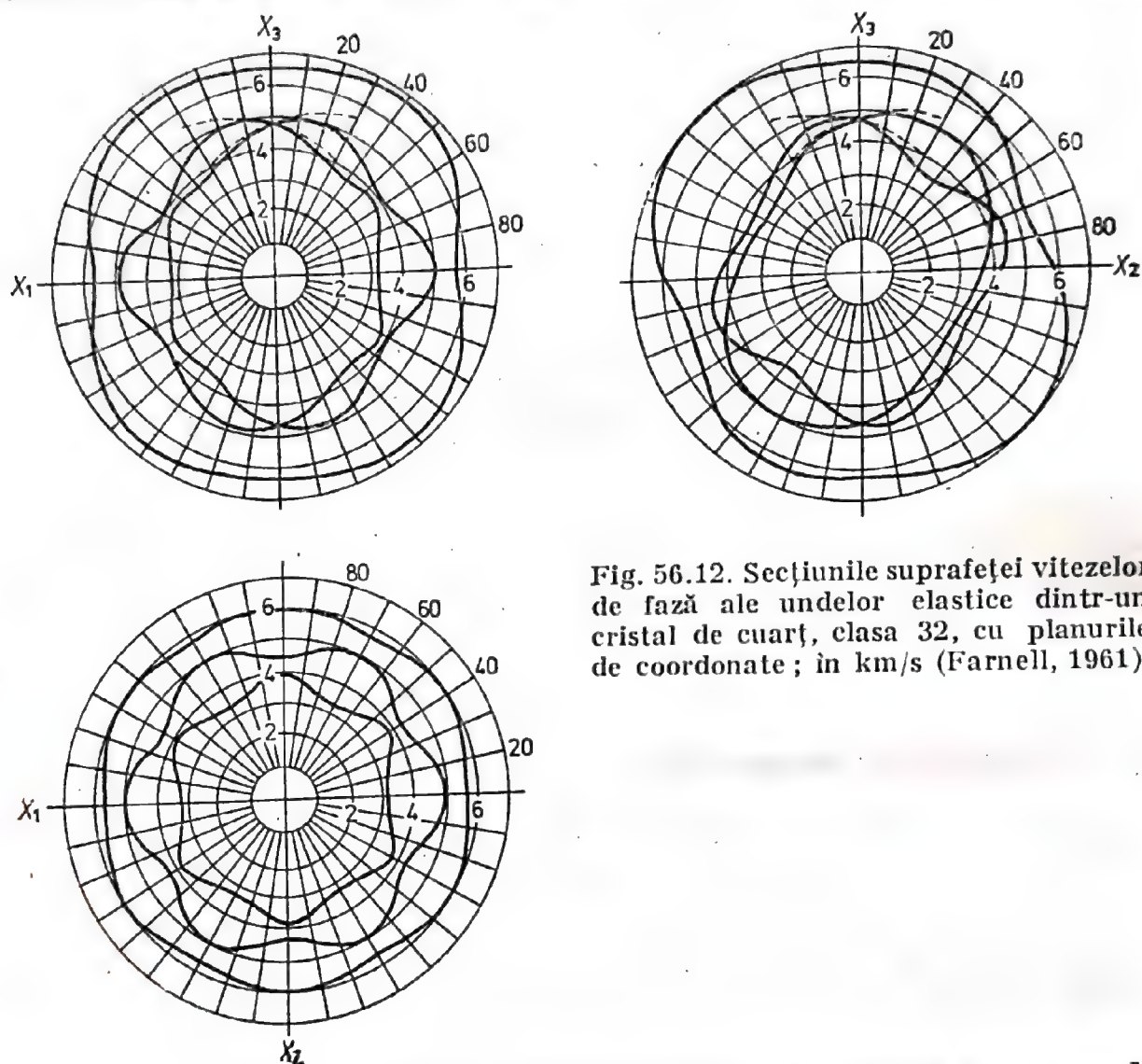


Fig. 56.12. Secțiunile suprafeței vitezelor de fază ale undelor elastice dintr-un cristal de cuarț, clasa 32, cu planurile de coordonate; în km/s (Farnell, 1961).

iar în figura 56.15 aceleași secțiuni pentru un cristal tetragonal. În figura 56.14 sînt reprezentate deviațiile polarizării undelor evasilongitudinale și ale vitezei radiale față de direcția normalei de undă; deviațiile vitezei radiale sînt reprezentate și în figura 56.16, ele ajungînd pînă la 73° (v. fig. 56.16, b).

În afară de suprafața vitezelor de fază se mai folosește și suprafața de refracție (F. I. Fiodorov, 1965); ea mai este numită și suprafața vitezelor inverse sau suprafața „micșorării vitezelor” (slowness surface). Aceasta reprezintă locul geometric al vîrfurilor tuturor vectorilor de refracție posibili, $n = m/v$, care sînt duși din același punct. Ecuația ei,

$$\det \|c_{ijkl}n_jn_k - \rho\delta_{il}\| = 0, \quad (56.28)$$

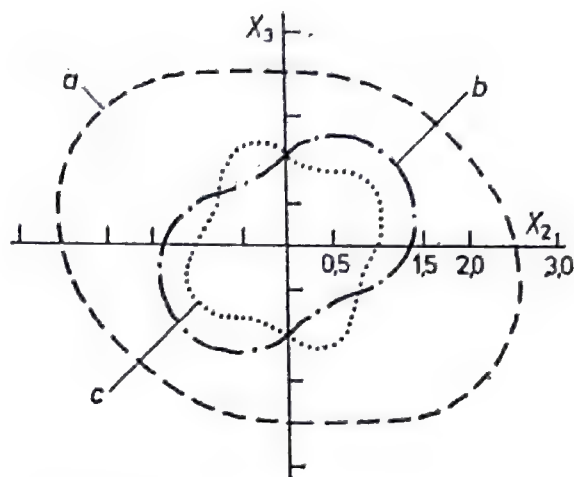
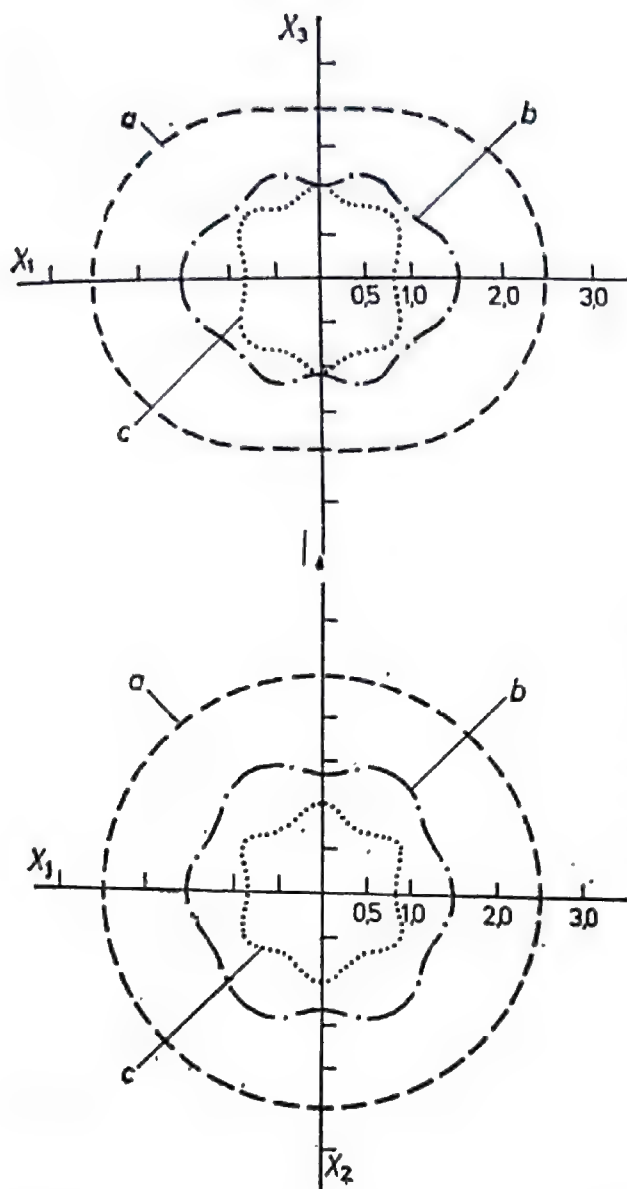


Fig. 56.13. Secțiunile suprafețelor de fază ale undelor elastice în cristalul de bismut, clasa $\bar{3}m$, cu planurile de coordonate ale sistemului cristalofizic. Liniile întrerupte corespund undelor cvasilongitudinale, liniile punctate și cele desenate cu linie-punct corespund undelor cvasitransversale; A — direcția normalei longitudinale; în km/s (Pace și Saunders, 1971).

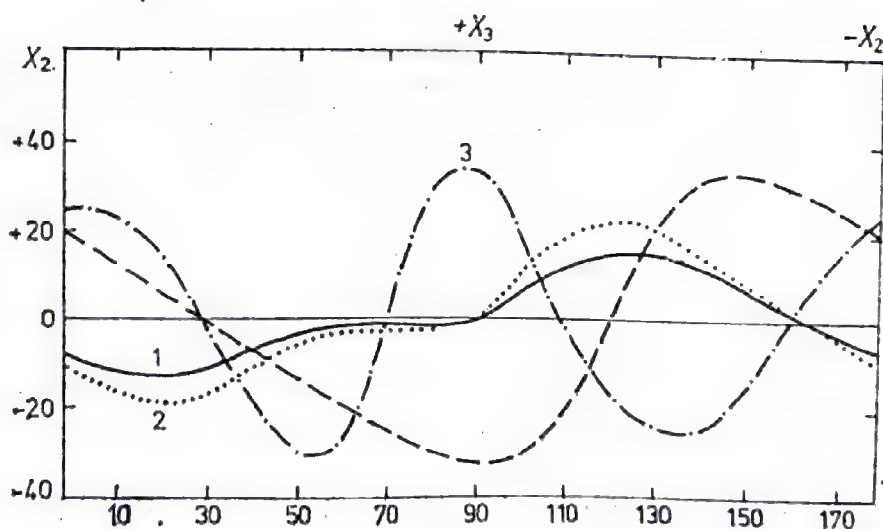


Fig. 56.14. Deviația (în grade) a vectorului de polarizare a unei cvasilongitudinale (1) și a vectorilor radiali ai unei cvasilongitudinale (2) și ai undelor cvasilongitudinale (3 și 4), față de direcția vectorului normalei de undă, pentru undele care se propagă în planul de simetrie X_1X_2 (de comparat cu figura 56.13) pentru cristalul de bismut (Pace și Saunders, 1971).

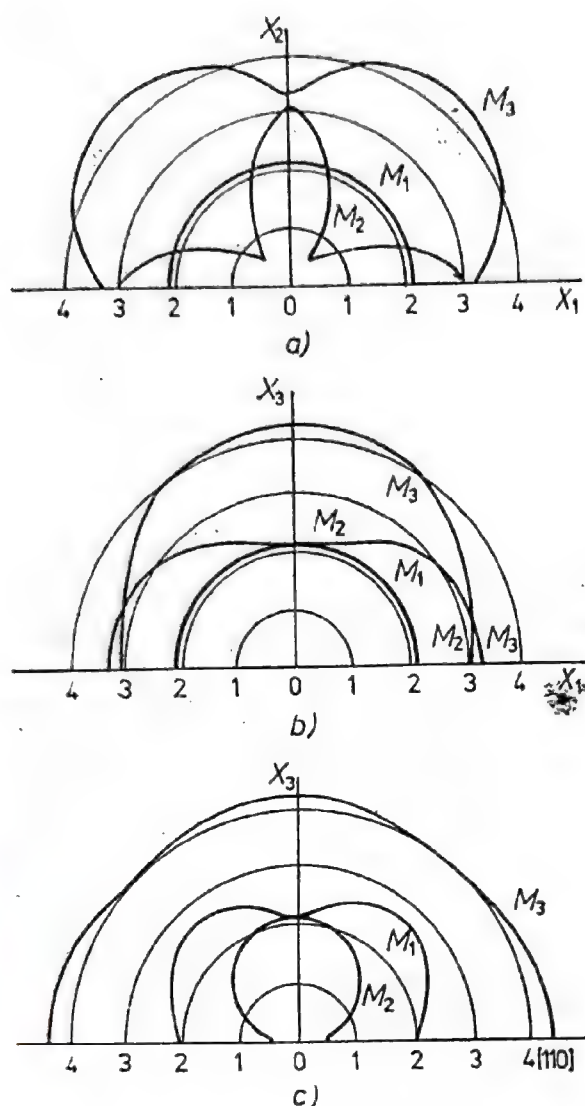


Fig. 56.15. Secțiunile suprafeței vitezelor de fază ale undelor elastice într-un cristal de paratellurit TeO_2 , clasa 422: a) cu planul (001); b) cu planul (010); c) cu planul (110); în km/s (Ohmachi, Uchida, Niizechi, 1972).

se obține, ca și (56.25), din condiția de existență a soluțiilor nenule ale ecuațiilor Christoffel, însă, spre deosebire de (56.25), ecuația (56.28) este de gradul șase. După orice direcție, razele vectoriale ale suprafeței de refracție și ale suprafeței vitezelor de fază sînt inverse una față de cealaltă

$$n(\mathbf{m}) = \frac{1}{v(\mathbf{m})} ;$$

cunoscînd deci forma uneia dintre ele, nu este greu să ne-o imaginăm și pe cealaltă. Trei suprafețe dintre acestea sînt prezentate în figurile 56.5, b, 56.7, b, 56.9, b etc. Ele sînt analoage cu suprafețele indicilor de refracție, folosite în optica cristalelor.

Dacă dintr-un punct oarecare O se duc toți vectorii posibili ai vitezei radiale, w , atunci vîrfurile lor formează *suprafața vitezelor radiale*. Ea se mai numește și *suprafața de undă*, deoarece după cum rezultă din definiția sa este locul geometric al punctelor

pină la care ajunge simultan unda acoustică emisă de o sursă punctuală, aflată în punctul O . Deci normala la suprafața de undă este normala de undă, iar un plan tangent la ea este planul frontului de undă. Perpendiculara la planul tangent, dusă din punctul O , reprezintă vectorul viteză de fază, v . Dacă se construiesc planurile

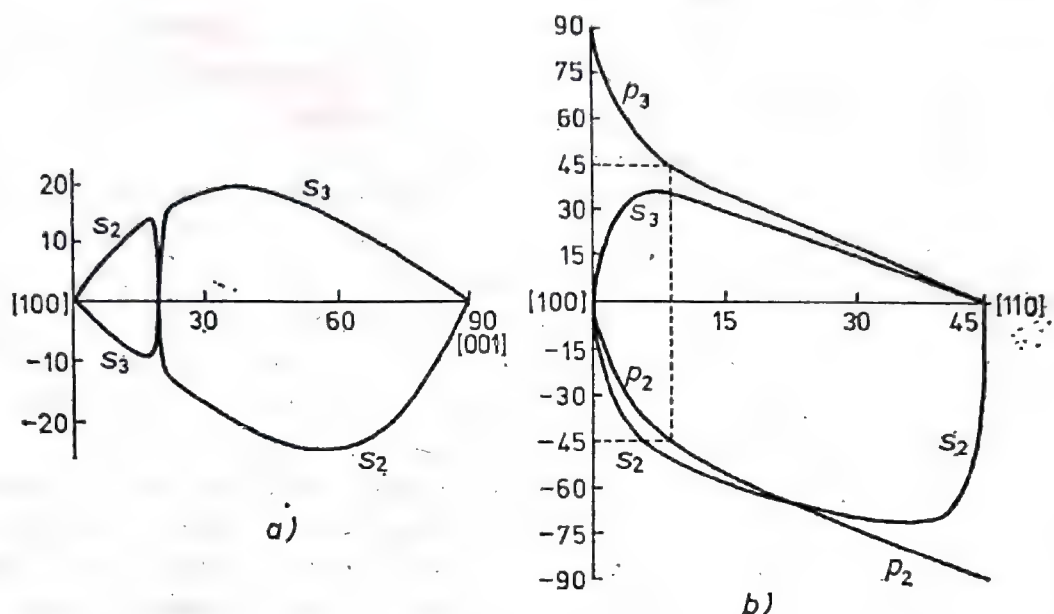


Fig 56.16. Deviația (în grade) a vectorului de polarizare, p , și a razei s , față de normala de undă în paratellurit: $a)$ în planul (001) ; $b)$ în planul (110) . Indicii corespund figurii 56.11. După Ohmachi, Uchida, Niiuchi, 1972.

tangente în fiecare punct al suprafeței de undă, atunci capetele perpendicularelor duse pe ele din centrul suprafeței de undă vor alcătui suprafața vitezelor; aceasta înseamnă că suprafața vitezelor este ponderala suprafeței de undă. În direcțiile în care se propagă undele ordinare pinzele corespunzătoare suprafeței de undă și suprafeței vitezelor se ating astfel încât raza vectorie este normala lor comună. Relația dintre cele două suprafețe — a vitezelor de fază și a vitezelor radiale — este reprezentată în figura 56.11.

În acustica cristalelor nu există relațiile de dualitate, atât de caracteristice pentru optica cristalelor (v. §36) (în general, despre analogia dintre acustica cristalelor și optica cristalelor se pot vedea date în K. S. Aleksandrov, 1956, și Henneke și Green, 1969). Aceasta se manifestă mai ales prin faptul că ecuația suprafeței vitezelor radiale este considerabil mai complicată decât ecuațiile suprafeței vitezelor de fază, (56.25) și a suprafeței de refracție, (56.28): gradul acestei ecuații și deci ordinul suprafeței ajunge pină la 150 (F. I. Fiodorov, 1965). Corespunzător este mai complicată și suprafața însăși. Pe ea, spre deosebire de suprafața vitezelor, pe lângă punctele și liniile de autointersecție (ieșirile axelor

acustice) pot exista frîngeri (linii de întoarcere). Deocamdată au fost cercetate numai secțiunile acestor suprafețe cu planurile de simetrie (F. I. Fiodorov, 1965). Pentru cristalele hexagonale ele sînt reprezentate în figurile 56.5, *c* și 56.7, *c*.

Secțiunile suprafețelor vitezelor radiale ale cristalelor cubice cu planurile $\{100\}$ și $\{110\}$ sînt date în figurile 56.9, *c* și *f* și 56.10, *b*. Să le comparăm cu secțiunile suprafețelor vitezelor de fază. Secțiunea cu planul $\{001\}$ a pînzei corespunzătoare undelor pur transversale în acest plan este un cerc ce coincide cu secțiunea suprafeței vitezelor de fază, pe cînd secțiunea sa cu planul $\{110\}$ are forma unei elipse, ale cărei semiaxe sînt egale cu semiaxele ovalului vitezelor de fază. Extrem de complicate sînt formele secțiunilor pinzei undelor de cvasiforfecare în $\{100\}$ și $\{110\}$, pe care apar discontinuități. Prin urmare, în cristalele cubice (ca și în cele hexagonale, vezi figurile 56.5, *c* și 56.7, *c*) pot exista și direcții după care se propagă nu numai trei unde elastice, ci cinci, care diferă prin vitezele lor: o undă cvasilongitudinală, una transversală și încă trei unde cvasitransversale, adică unei singure raze îi corespund cinci normale, în ciuda faptului că unei singure normale îi corespund totdeauna exact trei raze, adică trei direcții de propagare a energiei. Acest fenomen a fost studiat amănunțit (v. fig. 56.11), fiind verificat experimental de K. S. Aleksandrov (1965) pe cristalul de KBr.

Asupra reflexiei și refracției undelor acustice pe suprafața unui cristal v. F. I. Fiodorov (1965) și K. S. Aleksandrov (1962).

În general, pentru teoria elasticității cristalelor și a problemelor înrudite se pot consulta lucrările: Goldenblat (1969); Iliușin (1971); Landau și Lifșiț (1965); Leibfried (1963); Lejnițki (1950); Lure (1955, 1970); Perelomova (1971); Sedov (1962 și 1970); F. I. Fiodorov (1965); Musgrave (1970).

TERMODINAMICA CRISTALELOR

§ 57. ENERGIA INTERNĂ ȘI POTENȚIALUL
TERMODINAMIC AL CRISTALULUI

Lucrul efectuat asupra unității de volum al unui cristal de către un câmp electric și de către tensiunile mecanice este egal, respectiv cu

$$\delta R_{el} = \frac{1}{4\pi} E_i dD_i = \frac{1}{4\pi} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}, \quad (57.1)$$

$$\delta R_{mec} = \sigma_{ij} d\epsilon_{ij} = \sigma_\lambda d\epsilon_\lambda = \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\epsilon}.$$

Dacă se introduce vectorul $\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{D}/4\pi$ pentru a da aceeași formă formulelor, atunci variația totală a energiei interne a unității de volum a unui cristal supus unor acțiuni termice, mecanice și electrice infinit mici, se va putea scrie sub forma

$$dU = TdS + E_i d\tilde{D}_i + \sigma_\lambda d\epsilon_\lambda \quad (57.2)$$

(T fiind temperatura absolută, iar S entropia unității de volum).

Din punct de vedere strict formal, expresia (57.2) nu este corectă. În realitate, un corp solid în care tensiunile nu se reduc la o întindere în toate direcțiile, nu este în stare de echilibru termodinamic. Într-adevăr, cu trecerea timpului corpul se poate recrystaliza, dar toate tensiunile, în afară de întinderea în toate direcțiile dispar; abia acum se va ajunge la un echilibru termodinamic deplin. Deoarece durata stabilirii echilibrului este peste măsură de mare, de foarte multe ori sîntem obligați să avem de a face cu corpuri solide în care acest echilibru nu a reușit încă să se stabilească. Formula (57.2) permite descrierea tocmai a unor astfel de corpuri.

Entropia, inducția electrică, componentele deformației s-a convenit să fie numite *coordonate termodinamice generalizate*, pe cînd temperatura, intensitatea câmpului electric, tensiunile mecanice — *forțe termodinamice generalizate*.

Vom introduce notațiile

S	\tilde{D}_1	\tilde{D}_2	\tilde{D}_3	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
T	E_1	E_2	E_3	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6
X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9

În aceste notații, diferențiala totală a energiei interne, (57.2), va căpăta forma

$$dU = X_A dx_A \quad (57.3)$$

(aici și în continuare, literele A, B, C, \dots parcurg valorile $0, 1, \dots, 9$). Mărimile X_A și x_A pot fi considerate componente ale unor vectori în spațiul cu 10 dimensiuni; în acest caz, combinația $X_A dx_A$ capătă sensul de produs scalar.

Formula (57.3) permite să numim energia internă potențialul termodinamic în raport cu coordonatele generalizate, dat fiind că oricare dintre forțele generalizate va fi egală cu derivata energiei interne în raport cu coordonata generalizată corespunzătoare

$$X_A = \frac{\partial U}{\partial x_A} \quad (57.4)$$

cînd celelalte coordonate generalizate se consideră constante, adică energia internă se consideră funcție de coordonatele generalizate și nu de orice alte variabile. Drept variabile independente este însă mai comod să se folosească nu coordonatele generalizate, ci forțele generalizate: în cadrul efectuării unei experiențe în condiții obișnuite, putem regla variația temperaturii, a intensității cîmpului electric, a tensiunilor mecanice; din contra, variația entropiei, a inducției electrice, a deformațiilor este dificil de reglat nemijlocit.

Potențialul termodinamic în raport cu forțele generalizate este reprezentat de funcția

$$\Phi = U - TS - E_i \tilde{D}_i - \sigma_\lambda \varepsilon_\lambda = U - X_A x_A, \quad (57.5)$$

a cărei diferențială totală exactă este egală cu

$$d\Phi = -SdT - \tilde{D}_i dE_i - \varepsilon_\lambda d\sigma_\lambda = -x_A dX_A; \quad (57.6)$$

ea se numește *potențial termodinamic* (în sensul strict al cuvintului) sau *energia liberă Gibbs*. Dacă ea este considerată funcție de forțele generalizate, atunci orice coordonată generalizată va fi egală cu

$$x_A = - \frac{\partial \Phi}{\partial x_A}. \quad (57.7)$$

Să dezvoltăm această expresie într-o serie Taylor, în vecinătatea unui punct oarecare $X_B = X_B^{(0)}$, cu alte cuvinte, a unei stări inițiale oarecare a cristalului, definită prin valori bine determinate $X_B^{(0)}$ ale forțelor termodinamice generalizate, oprindu-ne la termenii de ordinul întâi

$$x_A = - \frac{\partial \Phi}{\partial x_A} = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial X_A} \right)_0 - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_A \partial X_B} \right)_0 (X_B - X_B^{(0)}) - \dots \quad (57.8)$$

Aici

$$- \left(\frac{\partial \Phi}{\partial X_A} \right)_0 = x_A^{(0)}$$

este valoarea coordonatei termodinamice generalizate respective, a cristalului în starea inițială, când toate forțele termodinamice generalizate sînt egale cu $X_B^{(0)}$, iar

$$- \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_A \partial X_B} \right)_0$$

este valoarea derivatei acestei coordonate termodinamice în aceleași condiții.

Drept stare inițială a cristalului este convenabil să se ia o stare fără tensiuni (cu toți $\sigma_\lambda = 0$) și în absența cîmpului electric (toți $E_i = 0$). Așadar, dintre valorile inițiale ale forțelor termodinamice generalizate diferită de zero este numai $X_0^{(0)} = T_0$ — temperatura inițială a cristalului. Vom conveni să considerăm că în starea inițială cristalul nu este deformat și nici polarizat — aceasta înseamnă, de fapt, că temperatura T_0 se ia ca origine a măsurării deformărilor termice și a polarizărilor piroelectrice (polarizarea spontană fiind omisă în acest caz : pentru piroelectricii obișnuiți, datorită motivelor examinate în § 31, iar pentru seignettoelectrici, deoarece aproximația considerată aici este insuficientă pentru aceștia). Să notăm abaterile temperaturii și entropiei de la valorile inițiale cu

$$T - T_0 = \Theta, \quad S - S_0 = \Sigma$$



și să introducem, în afară de x_A și X_A , mărimile

$$y_A = \begin{cases} \Sigma & \text{pentru } A = 0, \\ x_A & \text{pentru } A = 1, \dots, 9; \end{cases} \quad Y_A = \begin{cases} \Theta & \text{pentru } A = 0, \\ X_A & \text{pentru } A = 1, \dots, 9. \end{cases}$$

Dezvoltările (57.8) se vor scrie acum în forma

$$y_A = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial Y_A \partial Y_B} \right)_0 Y_B = M_{AB} Y_B, \quad (57.9)$$

unde

$$M_{AB} = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial Y_A \partial Y_B} \right)_0 = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_A \partial X_B} \right)_0$$

sînt valorile derivatelor respective, cînd toți $Y_B = 0$.

Setul de numere M_{AB} poate fi considerat o matrice de ordinul zece, care transpune mulțimea vectorilor cu zece dimensiuni ai forțelor generalizate Y_A în mulțimea vectorilor tot cu zece dimensiuni, ai coordonatelor generalizate, y_A . Această matrice se numește *matricea potențialului termodinamic* Φ ; fiind formată din derivatele de ordinul doi ale acestuia, ea este, evident, simetrică

$$M_{AB} = M_{BA}. \quad (57.10)$$

O scriere mai detaliată a dezvoltărilor (57.9) este

$$\begin{aligned} \Sigma &= - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} \right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T \partial E_k} \right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T \partial \sigma_\mu} \right)_0 \sigma_\mu, \\ \tilde{D}_i &= - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial T} \right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial E_k} \right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial \sigma_\mu} \right)_0 \sigma_\mu, \quad (57.11) \\ \varepsilon_\lambda &= - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial T} \right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial E_k} \right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu} \right)_0 \sigma_\mu. \end{aligned}$$

Pentru a elucida sensul fizic al derivatei $(\partial^2 \Phi / \partial T^2)_0$, vom calcula variația entropiei unității de volum a unui cristal, la o creștere a temperaturii cu Θ° , în absența cîmpului electric și a tensiunilor mecanice

$$\Sigma = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} \right)_0 \Theta.$$

În acest caz, unitatea de volum a cristalului va primi cantitatea de căldură

$$Q = C_p \Theta,$$

unde C_p este căldura specifică a cristalului raportată la unitatea de volum, cînd cîmpul electric rămîne constant și tensiunile mecanice sînt constante. Pe de altă parte, deoarece $\Theta/T \ll 1$ (altfel nu ne-am fi putut limita în dezvoltare numai la primul termen care conține temperatura), această cantitate de căldură este aproximativ egală cu

$$Q = T_0 \Sigma.$$

Comparînd aceste expresii, obținem

$$-\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2}\right)_0 = \frac{C_p}{T_0}. \quad (57.12)$$

Celelalte elemente ale matricei potențialului termodinamic au următoarele denumiri și notații: coeficienții permitivității dielectrice (împărțiți la 4π)

$$\tilde{\chi}_{ik} = \frac{1}{4\pi} \chi_{ik} = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial E_k}\right)_0, \quad \frac{1}{4\pi} \chi = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}}\right)_0; \quad (57.13)$$

coeficienții deformabilității elastice

$$s_{\lambda\mu} = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu}\right)_0, \quad s = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma \partial \sigma}\right)_0; \quad (57.14)$$

coeficienții piroelectrici

$$p_i = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial T}\right)_0, \quad \mathbf{p} = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mathbf{E} \partial T}\right)_0; \quad (57.15)$$

coeficienții dilatării termice

$$\alpha_\lambda = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial T}\right)_0, \quad \alpha = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma \partial T}\right)_0 \quad (57.16)$$

și, în fine, coeficienții piezoelectricei

$$d_{i\mu} = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial \sigma_\mu} \right)_0, \quad \mathbf{d} = - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mathbf{E}, \partial \boldsymbol{\sigma}} \right)_0. \quad (57.18)$$

Toți acești coeficienți, în afara celor piezoelectricei, care vor fi studiați în § 58, au fost deja întâlniți în capitolele precedente.

Matricea potențialului termodinamic, M , se exprimă prin acești coeficienți în felul următor

$$M = \begin{vmatrix} C_p/T_0 & p_1 & p_2 & p_3 & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & \alpha_6 \\ p_1 & \tilde{\chi}_{11} & \tilde{\chi}_{12} & \tilde{\chi}_{13} & d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ p_2 & \tilde{\chi}_{12} & \tilde{\chi}_{22} & \tilde{\chi}_{23} & d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ p_3 & \tilde{\chi}_{31} & \tilde{\chi}_{23} & \tilde{\chi}_{33} & d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \\ \alpha_1 & d_{11} & d_{21} & d_{31} & s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ \alpha_2 & d_{12} & d_{22} & d_{32} & s_{12} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ \alpha_3 & d_{13} & d_{23} & d_{33} & s_{31} & s_{23} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ \alpha_4 & d_{14} & d_{24} & d_{34} & s_{14} & s_{24} & s_{34} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ \alpha_5 & d_{15} & d_{25} & d_{35} & s_{15} & s_{25} & s_{35} & s_{45} & s_{55} & s_{56} \\ \alpha_6 & d_{16} & d_{26} & d_{36} & s_{16} & s_{26} & s_{36} & s_{46} & s_{56} & s_{66} \end{vmatrix}.$$

Acum, expresiile (57.11) se scriu în formă definitivă astfel

$$\Sigma = (C_p/T_0) \Theta + p_k E_k + \sigma_\mu \sigma_\mu, \quad (57.18, a)$$

$$\tilde{D}_i = p_i \Theta + \tilde{\chi}_{ik} E_k + d_{i\mu} \sigma_\mu, \quad (57.18, b)$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta + d_{\lambda k} E_k + s_{\lambda\mu} \sigma_\mu, \quad (57.18, c)$$

sau, în forma fără coordonate,

$$\Sigma = (C_p/T_0) \Theta + \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (57.18, a')$$

$$\tilde{\mathbf{D}} = p \Theta + \tilde{\boldsymbol{\chi}} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (57.18, b')$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\alpha} \Theta + \mathbf{E} \cdot \mathbf{d} + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (57.18, c')$$

Expresia (57.18,b) pentru $\sigma = 0$ trece în ecuația de material a electrostaticii*, iar relația (57.18,c), pentru $E = 0$, în legea Hooke cu termenii care conțin temperatura. Din faptul că matricea potențialului termodinamic este simetrică, rezultă, prin urmare, simetricitatea tensorului permitivității dielectrice

$$\kappa_{ik} = \kappa_{ki} \quad (57.19)$$

și a coeficienților deformabilității elastice

$$s_{\lambda\mu} = s_{\mu\lambda}, \quad s_{ijkl} = s_{klij}. \quad (57.20)$$

În forma completă — pentru $E \neq 0$ și $\sigma \neq 0$ — formulele (57.18,b) și (57.18,c) arată că există posibilitatea ca inducția electrică să depindă de tensiunile mecanice, iar tensorul deformărilor, de intensitatea câmpului electric, așa că ambele dependențe pot fi determinate printr-un singur set al coeficienților $d_{i\mu}$. De ele sînt legate efectul piezoelectric și, respectiv, efectul piezoelectric invers, expuse în § 58.

Formula (57.18,a) arată că entropia unui cristal poate să depindă nu numai de temperatură, ci și de câmpul electric și de tensiunile mecanice, iar din faptul că matricea M este simetrică rezultă că această dependență este determinată cu ajutorul coeficienților piroelectrici și, respectiv, al coeficienților de dilatare termică. Astfel, sub acțiunea unui câmp electric E , entropia unității de volum a unui cristal piroelectric variază cu

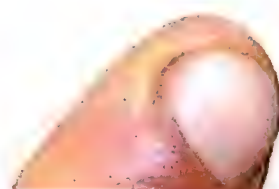
$$\Sigma = p_k E_k = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}. \quad (57.21)$$

Prin urmare, unitatea de volum a unui cristal absoarbe din mediul înconjurător cantitatea de căldură

$$Q = T_0 \Sigma = T_0 \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}. \quad (57.22)$$

Cuvîntul „absoarbe” este utilizat aici convențional. Dacă unghiul dintre vectorii \mathbf{p} și \mathbf{E} este mai mic de 90° , cantitatea de căldură este, într-adevăr, absorbită, dacă însă acest unghi este mai mare ca 90° ea va fi cedată de către cristal mediului înconjurător. Fenomenul descris poartă numele de efect *electrocaloric*.

* Aici lipsește termenul $\tilde{D}^{(0)} = \mathbf{P}^{(0)}$, care caracterizează polarizarea spontană a cristalelor piroelectrice. Am văzut deja în capitolul 3 că influența polarizării spontane practic este complet neutralizată datorită conductibilității finite a cristalului, pe de o parte, și depunerii de ioni din aer pe suprafețele încărcate ale cristalului, pe de alta. Considerarea acestui termen nu prezintă deci interes practic. Efectul piroelectric este însă inclus în studiu.



Efectul electrocaloric poate apărea și în alte condiții. Fie, la fel ca mai înainte, să nu existe tensiuni mecanice, iar schimbul de căldură cu mediul înconjurător să fie exclus. Este firesc să presupunem că în aceste condiții temperatura cristalului, care se află într-un câmp electric, să varieze. Și într-adevăr, formula (57.18,a) capătă în acest caz forma

$$0 = (C_p/T_0) \Theta + \mathbf{p} \cdot \mathbf{E},$$

deoarece condiția de izolare termică, pentru procesul invers, se reduce la $\Sigma = 0$. De aici, obținem că variația temperaturii este

$$\Theta = - (T_0/C_p) \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}. \quad (57.23)$$

Dacă câmpul electric este orientat după vectorul coeficienților piroelectrici, cristalul aflat în câmp electric se răcește; în caz contrar, cristalul se încălzește. Acest fapt este, desigur, în deplină concordanță cu comportarea reală a unui cristal ce se află în condiții izotermice.

Să continuăm examinarea egalității (57.18,a). Luând toate măsurile necesare ca din experiență să lipsească câmpul electric (sau mai simplu, luând un cristal nepiroelectric) aplicăm cristalului eforturile mecanice σ . Dacă procesul este izotermic, cristalul absoarbe cantitatea de căldură

$$Q = T_0 \alpha_\mu \sigma_\mu = T_0 \alpha : \sigma. \quad (57.24)$$

Căldura este într-adevăr absorbită numai în cazul în care tensiunile sînt orientate în aceeași direcție cu deformările termice, fiind însă cedată mediului înconjurător în caz contrar. În condiții de izolație termică, variația temperaturii cristalului, supus acțiunii tensiunilor mecanice, este egală cu

$$\Theta = - (T_0/C_p) \alpha_\mu \sigma_\mu = - (T_0/C_p) \alpha : \sigma. \quad (57.25)$$

Dacă tensiunile sînt îndreptate în aceeași direcție cu deformările termice, cristalul se răcește, iar în caz contrar el se încălzește. Fenomenele descrise se numesc *efect piezocaloric*.

Majoritatea cristalelor își măresc dimensiunile liniare odată cu creșterea temperaturii: $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n} > 0$ (\mathbf{n} — vectorul unitar). Aici orice tensiune de întindere, $\sigma = \sigma \mathbf{n} \mathbf{n}$ provoacă o răcire a cristalului izolat termic, pe cînd o tensiune de comprimare, o încălzire a lui. Cristalul de calcit însă, ale cărui dimensiuni liniare în

planul bazei se micșorează la încălzire (v. fig. 24.3), sub acțiunea unor tensiuni de întindere în planul bazei se încălzește, pe când sub acțiunea unor tensiuni de comprimare se răcește. Tensiunile de întindere și de comprimare, orientate de-a lungul axei optice a cristalului, duc însă la rezultate contrare.

§ 58. EFECTUL PIEZOELECTRIC ȘI SIMETRIA LUI

Studiul energiei interne și al potențialului termodinamic al unui cristal (§ 57) a explicat posibilitatea polarizării electrice a cristalului sub acțiunea unui câmp electric. Dacă în formulele (57.18,b) și (57.18,c) se păstrează numai termenii care descriu aceste fenomene, obținem

$$D_i = 4\pi d_{i\mu} \sigma_\mu, \quad \varepsilon_\lambda = d_{k\lambda} E_k. \quad (58.1)$$

Prima dintre aceste formule descrie efectul piezoelectric, iar cea de a doua efectul piezoelectric invers. Ambele sînt caracterizate de același set de coeficienți, $d_{i\mu}$, care sînt legați de tensorul coeficienților piezoelectricei,

$$\mathbf{d} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mathbf{E} \partial \boldsymbol{\sigma}} \right)_0, \quad d_{ikl} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \partial \sigma_{kl}} \right)_0 \quad (58.2)$$

prin relația (v. anexa F)

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (58.3)$$

Expresiile (58.1) pot fi scrise în forma

$$D_i = 4\pi d_{ikl} \sigma_{kl}, \quad \mathbf{D} = 4\pi \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}; \quad (58.4)$$

$$\varepsilon_{ij} = d_{kij} E_k, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{d}.$$

Cînd folosim formulele (58.1) și (58.4) trebuie să fim atenți la rolul diferiților indici. În formulele (58.1) indicele latin al lui $d_{i\mu}$ corespunde mărimilor electrice, fiind scris totdeauna primul; indicele notat cu literă grecească corespunde mărimilor mecanice. În formulele (58.4), primul indice corespunde mărimilor electrice, iar cel de al doilea și cel de al treilea, mărimilor mecanice. Corespunzător cu aceasta este luată și ordinea de înmulțire în formulele (58.4).

Tensorul coeficienților piezoelectricei, d , este un tensor de rangul trei; simetria lui este $V[V^2]$. Ca orice tensor de material de tip impar, el este identic egal cu zero pentru toate cristalele cu centru de simetrie. Prin urmare, în cristalele cu centru de simetrie (și în general în mediile omogene cu centru de simetrie, independent de structura lor), efectul piezoelectric nu este posibil. Forma pe care o ia tensorul d în grupurile cu centru de simetrie poate fi determinată apelând la metodele expuse în capitolul 5. Rezultatele unei asemenea investigații sînt cuprinse în tabelul E.11. O privire de ansamblu asupra acestui tabel arată că tensorul d ia valoarea zero în două grupuri punctuale, cu centru de simetrie: în grupul cristalografic 432 și în grupul limită $\infty\infty$ (remarcăm că aceasta este o consecință a simetriei interne $V[V^2]$ a tensorului d ; un tensor de rangul trei de formă generală, adică de simetrie internă V^3 nu se anulează în aceste grupuri). În celelalte clase cristalografice și în trei clase limită efectul piezoelectric este posibil. În cazul determinării numărului de clase cu simetrie piezoelectrică trebuie ținut seama, firește, de teorema lui Hermann; ca urmare a acestei teoreme, simetria proprietăților unor cristale (de pildă ale cristalelor din clasele $4mm$ și $6mm$ și ale texturilor din clasa ∞m) este aceeași. Pe lângă aceasta se poate arăta că cristalele din clasele $\bar{6}$ și $\bar{6}m2$ constituie o singură clasă de simetrie piezoelectrică, cu toate că forma tensorului d este diferită pentru aceste clase.

O situație analoagă am mai întâlnit cu ocazia examinării claselor de simetrie elastică (§ 52), ceea ce ne permite să trecem peste explicații detaliate. Forma tensorului d pentru cristalele din clasa $\bar{6}$ nu se poate „înăutăți” prin nici un fel de rotație a sistemului de coordonate în jurul axei X_3 , deoarece direcția axelor X_1 și X_2 nu este definită în clasa $\bar{6}$ de către elementele de simetrie ale cristalului. Însă rotind sistemul de coordonate în jurul axei X_3 cu un unghi oarecare, putem face ca una dintre cele două componente independente ale tensorului d să devină zero și să-l aducem astfel la forma pe care o are tensorul d pentru cristalele clasei $\bar{6}m2$. Aceasta demonstrează că simetria reală a acestui tensor este $\bar{6}m2$.

Este necesar să avem în vedere că apartenența unui cristal dat la unele dintre clasele piezoelectrice nu înseamnă deloc că acest cristal are, într-adevăr, proprietăți piezoelectrice. Sînt cunoscute cristale dielectrice care aparțin claselor piezoelectrice în care nu se manifestă — în experiențe făcute cu suficientă precizie — nici un fel de proprietăți piezoelectrice. Prin aceasta, piezoelectricitatea nu se deosebește de celelalte proprietăți, ca elasticitatea sau dilatarea termică, pe care le au toate corpurile solide. Invers însă, apartenența unui cristal la una dintre clasele nepiezoelectrice constituie o garanție serioasă a absenței proprietăților piezoelectrice la acel cristal.

Celelalte variante ale efectului piezoelectric sînt permise pentru unele clase piezoelectrice, fiind interzise pentru altele. Aşa este, de exemplu, efectul piezoelectric care apare în cazul presiunii hidrostatice, exercitate din toate direcțiile. Din ecuația (58.4), pentru

$$\sigma_{kl} = - p \delta_{kl}$$

obținem

$$D_i = - 4\pi d_{ikk} p. \quad (58.5)$$

Prin urmare, polarizarea piezoelectrică apare în acest caz numai cu condiția ca componentele $d_i = d_{ikk}$ ale vectorului $\mathbf{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$ să fie diferite de zero. Evident, \mathbf{d} este un vector de material, iar vectorii de material sînt diferiți de zero numai în cazul în care ei exprimă proprietățile cristalelor din clasele piroelectrice. Din această cauză, efectul descris este posibil numai în 10 clase cristalografice și în două clase limită din numărul de 20 de clase cristalografice și 3 clase limită care permit, în general, efectul piezoelectric (tabelul 58.1).

Tabelul 58.1

Vectorul efectului piezoelectric sub acțiunea presiunii hidrostatice $\mathbf{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$ ($d_i = d_{ikk}$)

Clasele	Vectorul \mathbf{d}
1	$(d_{11} + d_{12} + d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{21} + d_{22} + d_{23})\mathbf{e}_2 + (d_{31} + d_{32} + d_{33})\mathbf{e}_3$
m ($m \perp \mathbf{e}_2$)	$(d_{11} + d_{12} + d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{31} + d_{32} + d_{33})\mathbf{e}_3$
m ($m \perp \mathbf{e}_3$)	$(d_{11} + d_{12} + d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{21} + d_{22} + d_{23})\mathbf{e}_2$
2 ($2 \parallel \mathbf{e}_2$)	$(d_{21} + d_{22} + d_{23})\mathbf{e}_2$
2 ($2 \parallel \mathbf{e}_3$), $mm2$	$(d_{31} + d_{32} + d_{33})\mathbf{e}_3$
3, 4, 6, ∞ , $3m$, $4mm$, $6mm$, ∞m	$(2d_{31} + d_{33})\mathbf{e}_3$

Un al doilea exemplu este în legătură cu experiențele fraților Curie, în care a fost observat efectul piezoelectric : pe o față a unui cristal se așază o greutate, măsurîndu-se, pe aceeași față, densitatea de sarcină, ρ_{sup} . Deoarece starea de tensiune s-a redus la o comprimare într-o singură direcție,

$$\sigma_{kl} = - p n_k n_l$$

(\mathbf{n} fiind vectorul unitar al normalei la față), rezultă că

$$\rho_{\text{sup}} = - \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = p d_{ikk} n_i n_k n_l. \quad (58.6)$$

Evident că în astfel de măsurători apare numai partea simetrică a tensorului d_{ikl} — tensorul efectului piezoelectric longitudinal

$$f_{ikl} = d_{(ikl)} = \frac{1}{3}(d_{ikl} + d_{kli} + d_{lik}). \quad (58.7)$$

Într-adevăr, $n \cdot d : nn = n \cdot f : m$. Simetria internă a tensorului f este $[V^3]$. Spre deosebire de tensorul d , acesta are în general numai 10 componente independente, nu 18. Legătura dintre el și tensorul d este dată în tabelul 58.2. Coincidența dintre tensorii f și d în cazul unor cristale arată că pentru cristalele din aceste clase se pot obține toate componentele tensorului d din măsurarea efectului piezoelectric longitudinal. În cazurile însă în care tensorii f și d pentru cristalele dintr-o clasă dată sînt diferiți, determinarea componentelor d numai prin astfel de măsurători este, bineînțeles, imposibilă. În clasele piezoelectrice 422, 622, $\infty 2$ efectul piezoelectric longitudinal este interzis. Clasele de simetrie piezoelectrică longitudinală sînt enumerate în tabelul 58.3. Se vede că unele clase cristaline cuprinse în clase de simetrie piezoelectrică diferită intră în aceeași clasă de simetrie piezoelectrică longitudinală. Dintre acestea, deosebit de interesantă este clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală $\bar{4}3m$: din ea fac parte cristalele claselor $\bar{4}3m$, 23, $\bar{4}2m$, $\bar{4}$ și 222, care aparțin la trei sisteme diferite. Din clasele enumerate fac parte multe cristale piezoelectrice, importante pentru tehnică. În clasa 222 cristalizează cel mai important cristal piezoelectric-seignettoelectric, sarea Seignette, în clasa $\bar{4}2m$ cristalele deosebit de larg utilizate, de dihidrofosfat de potasiu (KDP) și de dihidrofosfat de amoniu (ADP) precum și întreaga familie izomorfă lor. O deosebită importanță în ultimii ani au căpătat-o semiconductorii piezoelectrice din clasa $\bar{4}3m$, cum ar fi sfaleritul, arseniura de galiu, antimoniura de indiu ș.a.

Tensorul efectului piezoelectric longitudinal pentru cristalele acestor clase are doar o singură componentă independentă, fiind multiplu al septorului unitar, $S^0[\bar{4}3m]$ (v. tab. 47.4), a cărei suprafață, reprezentată în figura 47.3, servește, prin urmare, drept suprafață universală a efectului piezoelectric longitudinal în toate cristalele de acest fel. Efectul piezoelectric longitudinal în direcția n se definește, în proiecția stereografică (fig. 47.3), cu ajutorul formulei

$$f(n) = f_{ijk}n_i n_j n_k = 2f_{123}S^0(n)/\sqrt{3}. \quad (58.8)$$

Tot o singură componentă independentă are și tensorul f pentru clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală $\bar{6}m2$, din care

Tabelul 58.2

Legătura dintre tensorul efectului piezoelectric longitudinal, f , și tensorul coeficienților piezoelectrici, pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor și texturilor care permit efectul piezoelectric (poziția componentelor lui f_{ikl} este aceeași ca în tabelul E.10)

Clasele	f_{ikl}			
1	d_{11} $\frac{1}{3}(d_{21} + d_{16})$ $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	$\frac{1}{3}(d_{12} + d_{26})$ d_{22} $\frac{1}{3}(d_{32} + d_{24})$	$\frac{1}{3}(d_{13} + d_{35})$ $\frac{1}{3}(d_{23} + d_{34})$ d_{33}	$\frac{1}{6}(d_{14} + d_{25} + d_{36})$
$\begin{smallmatrix} 2 \\ (2 \parallel X_2) \end{smallmatrix}$	0 $\frac{1}{3}(d_{21} + d_{16})$ 0	0 d_{22} 0	0 $\frac{1}{3}(d_{23} + d_{34})$ 0	$\frac{1}{6}(d_{14} + d_{25} + d_{36})$
$\begin{smallmatrix} 2 \\ (2 \parallel X_3) \end{smallmatrix}$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{32} + d_{24})$	0 0 d_{33}	$\frac{1}{6}(d_{14} + d_{25} + d_{36})$
$\begin{smallmatrix} m \\ (m \perp X_2) \end{smallmatrix}$	d_{11} 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	$\frac{1}{3}(d_{12} + d_{26})$ 0 $\frac{1}{3}(d_{32} + d_{24})$	$\frac{1}{3}(d_{13} + d_{35})$ 0 d_{33}	0
$\begin{smallmatrix} m \\ (m \perp X_3) \end{smallmatrix}$	d_{11} $\frac{1}{3}(d_{21} + d_{16})$ 0	$\frac{1}{3}(d_{12} + d_{26})$ d_{22} 0	$\frac{1}{3}(d_{13} + d_{35})$ $\frac{1}{3}(d_{23} + d_{34})$ 0	0
222	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{6}(d_{14} + d_{25} + d_{36})$
$mm2$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{32} + d_{24})$	0 0 d_{33}	0
3	d_{11} $-d_{22}$ $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	$-d_{11}$ d_{22} $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 d_{33}	0
$32, \bar{6}2m$ $(2 \parallel X_1)$	d_{11} 0 0	$-d_{11}$ 0 0	0 0 0	0
$32, \bar{6}m2$ $\begin{smallmatrix} 2 \parallel X_2 \\ m \perp X_1 \end{smallmatrix}$	0 $-d_{22}$ 0	0 d_{22} 0	0 0 0	0

Tabelul 58.2 (continuare)

Clasele	f_{ikl}			
$3m$ ($m \perp X_1$)	0 $-d_{22}$ $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 d_{22} $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 d_{33}	0
$\bar{6}$	d_{11} $-d_{22}$ 0	$-d_{11}$ d_{22} 0	0 0 0	0
$\bar{4}$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 $-\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 0	$\frac{1}{6}(2d_{14} + d_{35})$
$\bar{4}2m$	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{6}(2d_{14} + d_{35})$
4, 6, ∞ , 4mm, 6mm, ∞m	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31} + d_{15})$	0 0 d_{33}	0
23, $\bar{4}3m$	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}d_{14}$

Observație. În toate clasele cu centru de simetrie precum și în clasele $\infty\infty$, 432, 622, 422, $\infty 2$ tensorul $f = 0$.

fac parte cristalele din clasele $\bar{6}m2$ și 32; el este un multiplu al septorului unitar, $S^\circ[\bar{6}m2]$ (v. tab. 47.3) a cărei suprafață (fig. 47.4) este, de asemenea, o suprafață universală a efectului piezo

Tabelul 58.3

Simetria efectului piezoelectric longitudinal

Clasele de simetrie piezoelectrică longitudinală	Cristalele în care efectul piezoelectric prezintă o asemenea simetrie
1	1
m	m
$mm2$	2, $mm2$
$3m$	3, $3m$
$\bar{6}m2$	32, $\bar{6}$, $\bar{6}m2$
∞m	4, 6, ∞ , 4mm, 6mm, ∞m
$\bar{4}3m$	222, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 23, $\bar{4}3m$

electric longitudinal, în cristalele din clasele respective. Efectul piezoelectric longitudinal se calculează în acest caz folosind proiecția stereografică din figura 47.4 și formula

$$f(\mathbf{n}) = -f_{222}S^0(\mathbf{n}). \quad (58.9)$$

Pentru clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală ∞m avem

$$f_{ijn} = F_V V_i^0 \delta_{jn} + F_S S_{ijn}^0, \quad (58.10)$$

unde tensorii ireductibili unitari ai simetriei ∞m — vectorul V și septorul S — sînt definiți de formulele (de comparat cu tabelul 47.4 și formulele (52.10) și (52.11))

$$V_i^0 = k_i, \quad (58.11)$$

$$S_{ijn}^0 = \frac{1}{2} (5k_i k_j k_n - 3k_i \delta_{jn}) \quad (58.12)$$

(k este vectorul unitar al axei X_3), coeficienții tensorilor unitari fiind

$$F_V = \frac{3}{5} (f_{333} + 2f_{113}), \quad F_S = \frac{2}{5} (f_{333} - 3f_{113}). \quad (58.13)$$

Suprafețele efectului piezoelectric longitudinal pentru cristalele care intră în această clasă de simetrie piezoelectrică longitudinală sînt suprafețe de rotație

$$f(\mathbf{n}) = F_V V^0(\mathbf{n}) + F_S S^0(\mathbf{n}), \quad (58.14)$$

unde $V^0(\mathbf{n})$ și $S^0(\mathbf{n})$ sînt suprafețele vectorului și, respectiv, septorului unitari, ale căror secțiuni sînt date în figura 47.1. În funcție de raportul dintre coeficienții F_V și F_S , ele pot avea caracter de septor sau caracter de vector; din primul tip face parte suprafața efectului piezoelectric longitudinal în sulfura de cadmiu, CdS (clasa $6mm$); din cel de al doilea tip face parte titanatul de bariu, BaTiO₃ (clasa $4mm$), figura 58.1. Ambele cristale sînt larg utilizate în tehnică.

Dacă suprafața efectului piezoelectric longitudinal nu este o suprafață de rotație, este mai comod ca ea să fie reprezentată cu ajutorul proiecțiilor stereografice (v. § 24). Astfel, în figura 44.2

sînt reprezentate cele două proiecții stereografice și secțiunea suprafeței efectului piezoelectric longitudinal al unui cristal de turmalină (clasa $3m$). Proiecțiile stereografice ale suprafețelor efectului piezoelectric longitudinal în două dintre cristalele sistemului monoclinic sînt reprezentate în figurile 58.2 și 58.3. Este

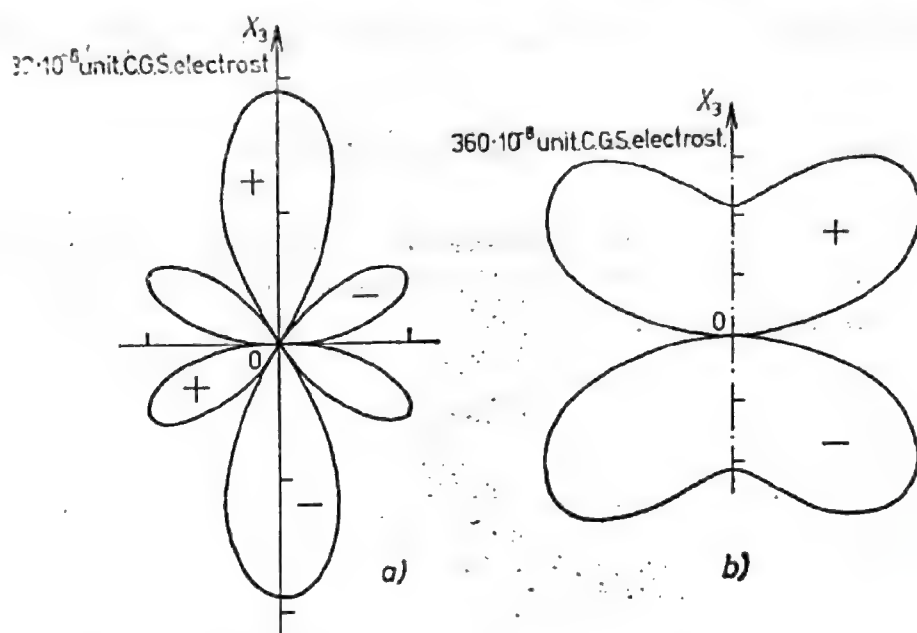


Fig. 58.1. Secțiuni ale suprafețelor efectului piezoelectric longitudinal, reprezentînd suprafețe de rotație : a) pentru un cristal de sulfură de cadmiu, CdS, clasa $6mm$; b) pentru un cristal de titanat de bariu, BaTiO₃, clasa $4mm$. Simetria suprafețelor este ∞m , iar antisimetria $\infty/m'm$ (v. § 68) (Butabaev și Sirotin, 1972).

remarcabil caracterul complet diferit al anizotropiei acestor cristale, care aparțin aceleiași clase, anume clasa 2. Simetria efectului piezoelectric longitudinal în aceste cristale este $mm2$; planurile de simetrie care trec prin axa 2 pot fi determinate din figurile 58.2 și 58.3, dar ele ar apărea mult mai intuitiv dacă axa 2 ar fi scoasă prin centrul proiecției.

Coeficienții piezoelectrici ai unor cristale sînt cuprinși în tabelul 58.4 (cu privire la coeficientul piezoelectric $e_{k\lambda}$, v. § 61).

Studiind influența simetriei cristalelor asupra proprietăților piezoelectrice, am folosit formele generale ale tensorului coeficienților piezoelectrici, d , calculate pentru diferite clase cristalografice. Unele dintre rezultatele acestui studiu se pot obține fără nici un calcul, plecînd numai de la principiul Curie și teorema lui Hermann. Tocmai de acest lucru ne vom ocupa aici.

Pentru ca într-un cristal (și în general într-un mediu omogen oarecare) să poată apărea o polarizare electrică sub influența unor anumite condiții exterioare este necesar ca în cristalul supus acestor acțiuni să existe cel puțin o direcție polară specială, pentru aceasta fiind necesar, la rîndul său (v. §§ 3, 25 și anexa C), ca grupul de simetrie al mediului supus acțiunii exterioare să fie ∞m , sau orice grup al său

$$\infty m \supseteq G_{\text{med. act}} \quad (58.15)$$

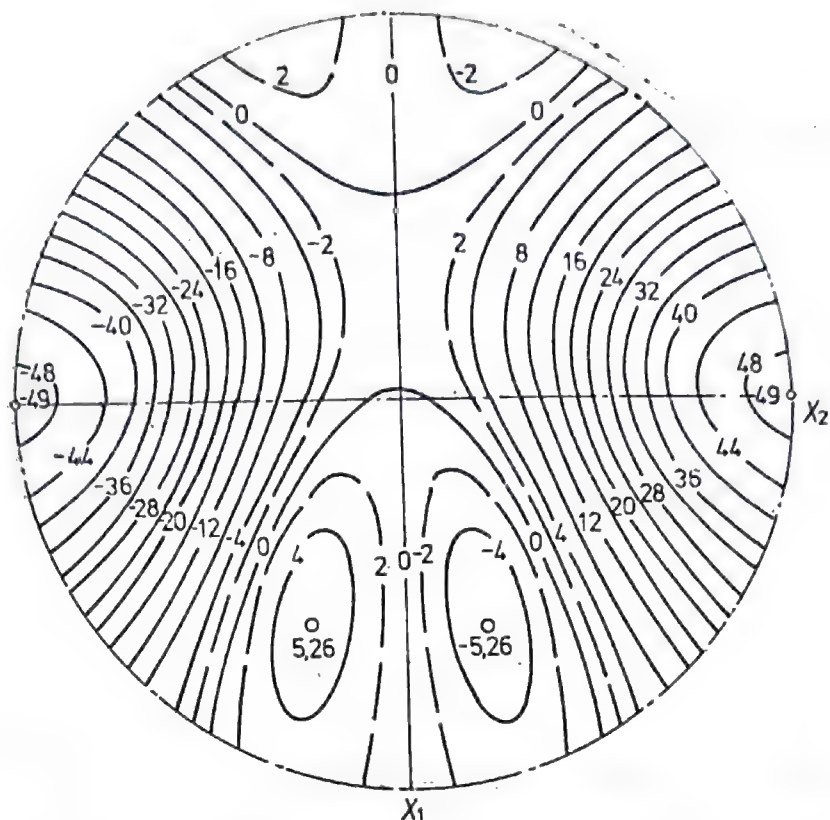


Fig. 58.2. Proiecția stereografică a suprafeței efectului piezoelectric longitudinal în sulfatul de litiu, $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, clasa 2. Simetria suprafeței este $mm2$, antisimetria mmm' . În 10^{-8} unități CGSel.

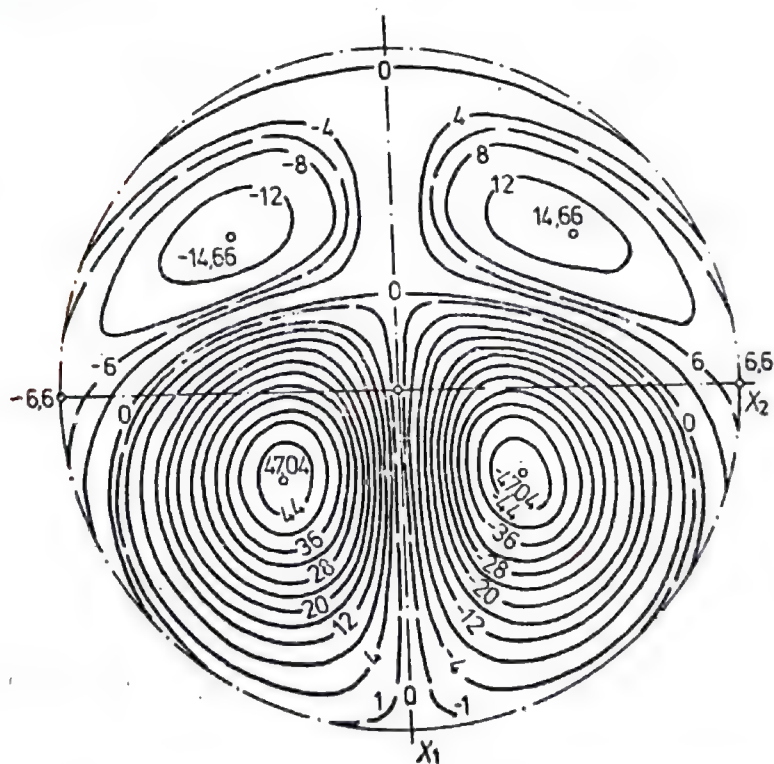


Fig. 58.3. Proiecția stereografică a efectului piezoelectric longitudinal într-un cristal de etilendiamintartrat, clasa 2. Simetria suprafeței este $mm2$, iar antisimetria mmm' . În 10^{-8} unități CGSel.

Tabelul 58.4

Coeficienții piezoelectricei, $d_{k\lambda}$ (în 10^{-8} unit. CGSel), și $e_{k\lambda}$ (în 10^4 unit. CGSel), pentru unele cristale

Clasa $\bar{4}3m$			d_{14}		e_{14}					
GaAs ZnS			7,80 -9,80		6,3 -4,41					
Clasele 4mm, 6mm, 6			d_{14}	d_{15}	d_{31}	d_{33}				
BaTiO ₂ CdS LiKSO ₄			5,4	1176 -42,9 2,7	-103,5 -11,01 -7,1	256,8 32,01 15,6				
Clasa 3m			d_{15}	d_{22}	d_{31}	d_{33}	e_{15}	e_{22}	e_{31}	e_{33}
Turmalină			-10,9	-1,0	-1,03	-5,5	-7,2	-1,05	-3,9	-9,3
Clasa 32			d_{11}		d_{14}	e_{11}		e_{14}		
Cuarț α			6,93		-2,18	5,13		-1,22		
Clasa 222			d_{14}	d_{25}	d_{36}	e_{14}	e_{25}	e_{36}		
Sare Seignette			7000	-169	35,5	140	-4,7	3,4		
Clasa mm2			d_{15}	d_{24}	d_{31}	d_{32}	d_{33}			
Rezorcină			53,9	55,3	-12,4	-12,8	10,8			
Clasa 2			d_{14}	d_{16}	d_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{25}	d_{34}	d_{36}
Li ₂ SO ₄ · H ₂ O			2,3	-6,0	-10,8	49	5,1	-15,0	-6,4	-12,6
Sulfat triglicinic			8,3	-13,7	70,7	23,8	76,0	73,0	-9,6	8,5
Etilendiamintartrat			-30,1	-36,6	30,3	6,6	-34,0	-53,8	-50,9	-55,1
Clasa 2			e_{14}	e_{16}	e_{21}	e_{22}	e_{23}	e_{25}	e_{34}	e_{36}
Li ₂ SO ₄ · H ₂ O			-1,58	-2,51	7,15	24,4	5,14	-0,45	-0,45	0,93
Etilendiamintartrat			-1,53	-1,88	3,83	2,61	-3,05	-4,79	-2,60	-2,83

Însă grupul de simetrie al mediului supus acțiunii, conform principiului Curie, nu trebuie să fie inferior intersecției (partea comună) celor două grupuri: grupul de simetrie al mediului liber, G_{med} , și grupul de simetrie al acțiunii, G_{act} ,

$$G_{\text{med, act}} \supseteq G_{\text{med}} \cap G_{\text{act}}. \quad (58.16)$$

Comparând relațiile (58.15) și (58.16), obținem, în final,

$$\infty m \supseteq G_{\text{med}} \cap G_{\text{act}}, \quad (58.17)$$

adică, pentru ca într-un mediu omogen, sub acțiunea unei anumite acțiuni exterioare, să poată apărea o polarizare electrică este necesar ca intersecția grupului de simetrie al mediului cu grupul de simetrie al acțiunii să fie grupul ∞m sau unul dintre sub-grupurile sale.

Această regulă generală este valabilă pentru toate formele de polarizare electrică. În cazul polarizării piezoelectrice simetria acțiunii din relația (58.17) este dată de unul dintre cele trei grupuri: $\infty\infty m$, pentru o comprimare după toate direcțiile, ∞/mm , pentru întinderea într-o singură direcție, mmm pentru toate celelalte cazuri.

În cazul general, în care $G_{\text{act}} = mmm$, condiția necesară pentru apariția polarizării piezoelectrice capătă forma

$$\infty m \supseteq G_{\text{med}} \cap mmm. \quad (58.18)$$

Deoarece grupul mmm are centru de simetrie, iar grupul ∞m nu are un astfel de centru de simetrie, condiția (58.18) este valabilă numai pentru grupurile lipsite de centru de simetrie, G_{med} : mediile omogene piezoelectrice nu au centru de simetrie.

Satisfac, oare, toate grupurile fără centru de simetrie, G_{med} , condiția (58.18)? Unul dintre ele, și anume $\infty\infty$, nu satisface această condiție în nici un caz. Într-adevăr, $\infty\infty \cap mmm = 222$, iar acest grup nu este nicidecum un subgrup al grupului ∞m . Prin urmare, în mediile de simetrie $\infty\infty$ polarizarea piezoelectrică nu este posibilă.

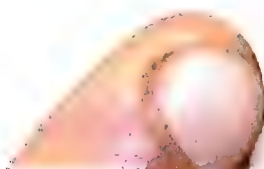
Cu totul altfel se rezolvă problema posibilității apariției polarizării piezoelectrice și a efectului piezoelectric în cristalele din clasa 432. Se poate ușor găsi o tensionare astfel încât $432 \cap mmm = 1$; este apoi suficient să o aplicăm în așa fel încât nici una dintre axele de simetrie ale tensorului tensiunilor să nu coincidă cu vreo axă de simetrie a cristalului. Însă în ciuda faptului că (58.18) este satisfăcută în acest caz, efectul piezoelectric *liniar* nu este posibil în cristalele din clasa 432. Într-adevăr, acest efect este descris de un tensor de rangul trei. Conform teoremei lui Hermann, axele de simetrie de ordinul patru reprezintă pentru el axe de ordin infinit. De aici rezultă clar că, în ceea ce privește simetria efectului piezoelectric linier, cristalele din clasa 432 nu se deosebesc de mediile din clasa $\infty\infty$, însă așa cum am văzut chiar acum, în mediile din clasa $\infty\infty$, polarizarea piezoelectrică este interzisă. Totuși, în afară de efectul piezoelectric linier, este posibil un efect piezoelectric pătratic extrem de slab, în cadrul căruia polarizarea depinde pătratic de componentele tensorului tensiunilor (v. § 74)

$$D_i = 4\pi Q_{ijklm} \sigma_{jk} \sigma_{lm}. \quad (58.19)$$

Deoarece efectul pătratic este definit printr-un tensor de rangul cinci, pe cînd ordinul axelor de simetrie al cristalelor din clasa 432 nu este mai mare de patru, teorema lui Hermann nu se poate aplica; prin urmare, polarizarea piezoelectrică de acest tip nu este interzisă de principiile de simetrie. Calculul arată că un tensor de material de rangul cinci, Q , de simetrie internă $V[[V^2]^2]$, pentru cristalele din clasa 432 poate avea, într-adevăr, componente diferite de zero (v. tab. E 23; forma unor astfel de tensori pentru cristalele tuturor claselor a fost dedusă de Koptik, 1966).

Analog se poate arăta că polarizarea piezoelectrică longitudinală în mediile cu simetria $\infty 2$ este interzisă de principiul Curie. Utilizînd și teorema lui Hermann, se poate dovedi că efectul piezoelectric longitudinal este interzis în cristalele din clasele 422 și 622.

Așadar, interdicțiile impuse de principiul Curie și condițiile de anulare a tuturor componentelor unui tensor de material nu coincid din punct de vedere al condi-



nutului. Interzicând polarizarea piezoelectrică în mediile cu simetria $\infty\infty$, principiul Curie exclude complet posibilitatea apariției în ele a polarizării electrice ca urmare a acțiunii tensiunilor mecanice, fără a se referi la caracterul dependenței funcționale a polarizării de tensiuni — dacă aceasta este liniară, pătratică sau și mai complicată. Dimpotrivă, din anularea tensorului coeficienților piezoelectrici pentru un mediu cu o simetrie determinată, rezultă doar că în acest mediu nu este posibilă o polarizare piezoelectrică care să depindă liniar de tensiuni; posibilitatea apariției unei polarizări piezoelectrice care să depindă de tensiuni printr-o legătură funcțională mai complicată (de exemplu, pătratică) nu este exclusă.

Având în vedere efectele piezoelectric, piezoelectric invers, electrocaloric și piezocaloric, obținem o schemă elegantă a interacțiunilor fenomenelor termice, electric și mecanic, care apar în cristale: orice forță termodinamică generalizată, aplicată unui cristal provoacă, în general, variația tuturor coordonatelor termodinamice generalizate. Această schemă este ilustrată în figura 58.4, luată, cu unele modificări, din lucrarea lui Nye (1967).

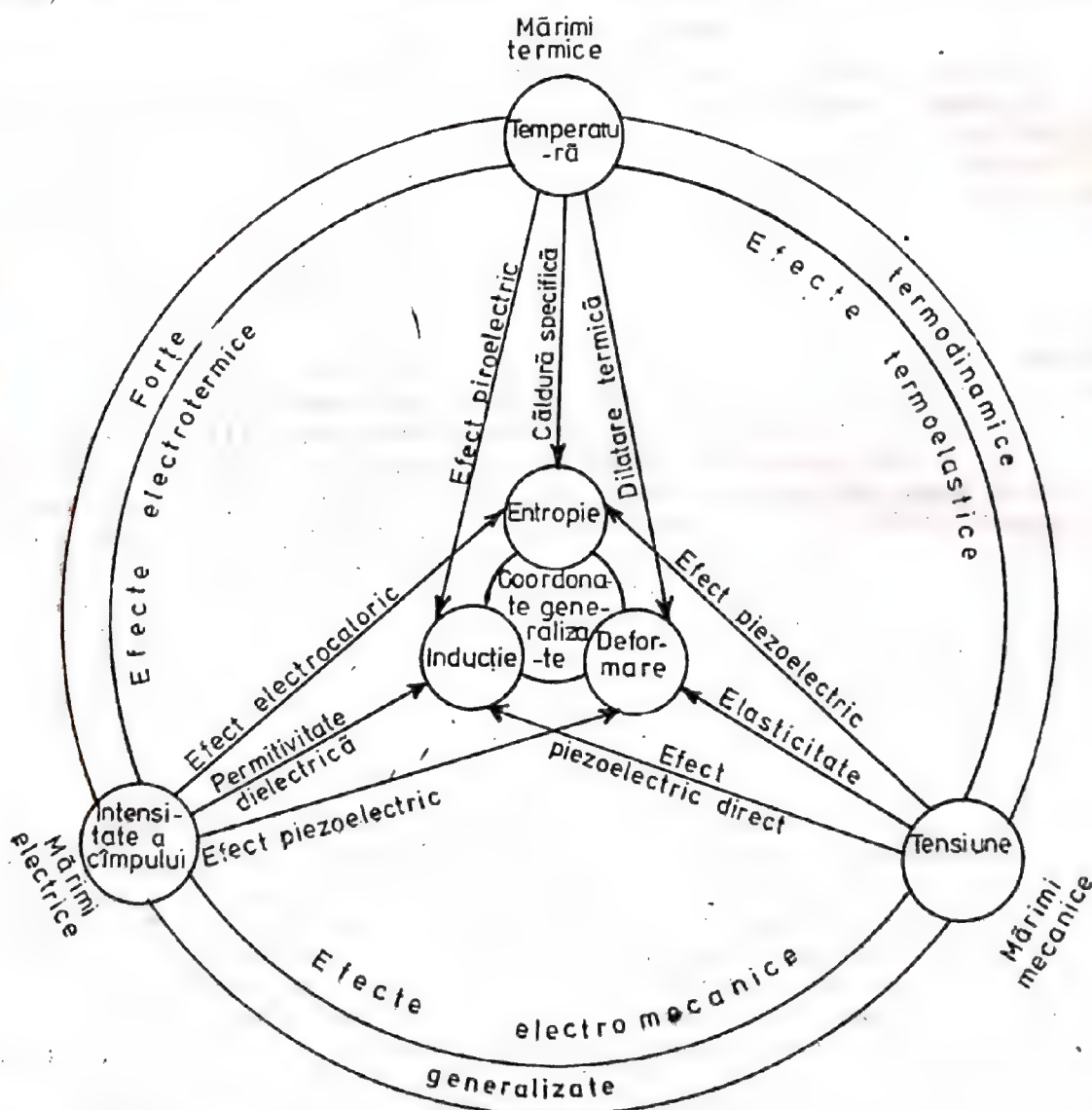


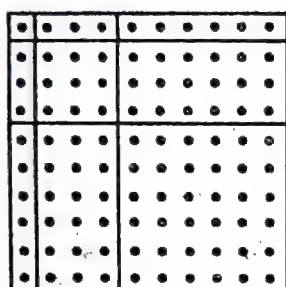
Fig. 58.4. Schema interacțiunilor dintre fenomenele termice, electrice și mecanice în cristale.

Schema interacțiunilor termice, electrice și mecanice ale proprietăților cristalelor se realizează complet numai în absența simetriei punctuale, adică în cazul cristalelor din clasa 1. Din nefericire, pînă în prezent nu există nici un cristal din clasa 1 pentru care să se fi reușit măsurarea tuturor componentelor. Simetria cristalelor duce la dispariția unora sau altora dintre interacțiuni. Acest fapt este ilustrat intuitiv de matricele din tabelul 58.5 (Nye, 1967).

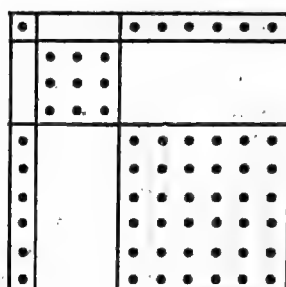
Matricele termodinamice, M , pentru toate clasele cristalografice și clasele limită

Sistemul triclinic

clasa 1

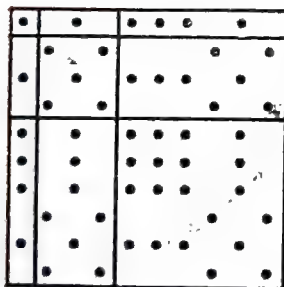


clasa 1

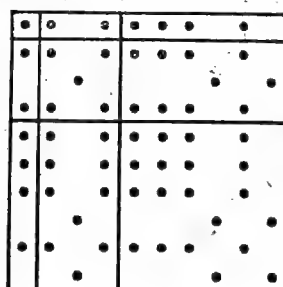


Sistemul monoclinic

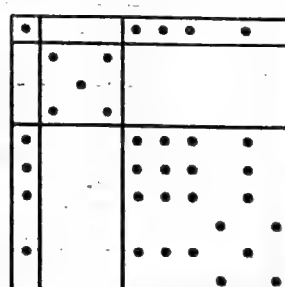
clasa 2



clasa m

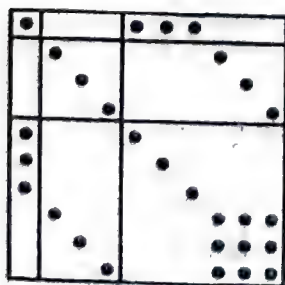


clasa 2/m

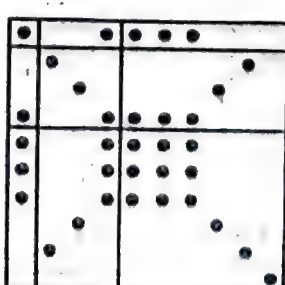


Sistemul rombic

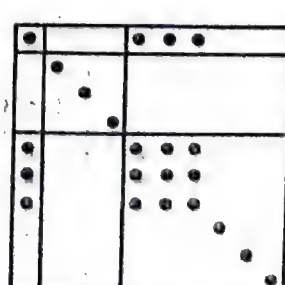
clasa 222



clasa mm2

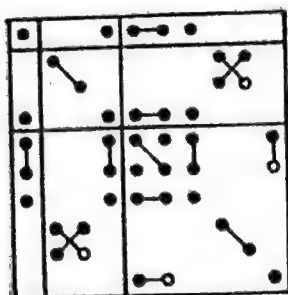


clasa mmm

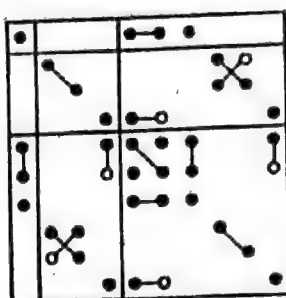


Sistemul tetragonal

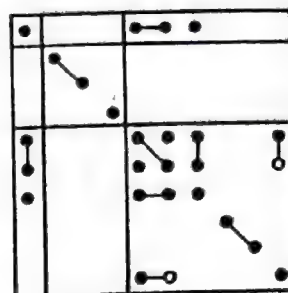
clasa 4



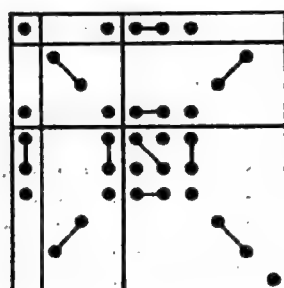
clasa $\bar{4}$



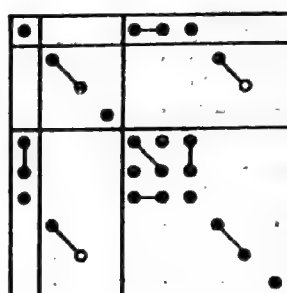
clasa 4/m



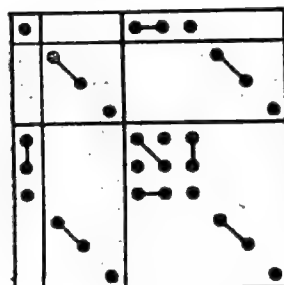
clasa 4mm



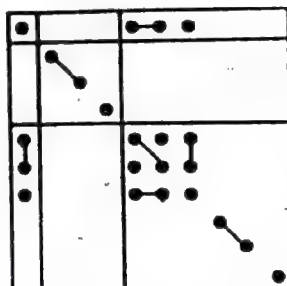
clasa 422



clasa $\bar{4}2m$

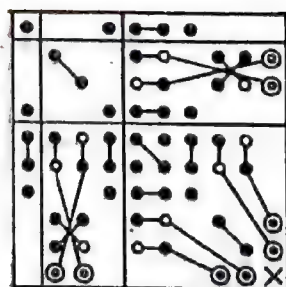


clasa 4/mmm

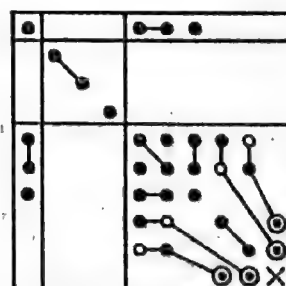


Sistemul trigonal

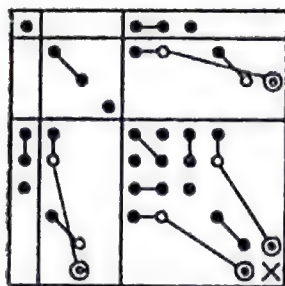
clasa 3



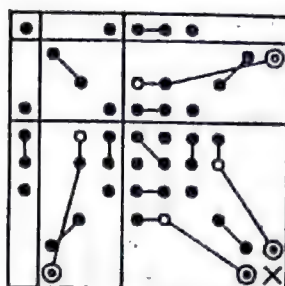
clasa $\bar{3}$



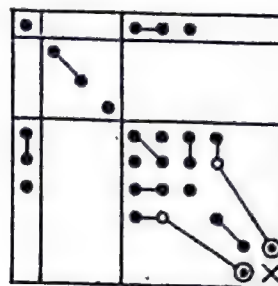
clasa 32



clasa 3m

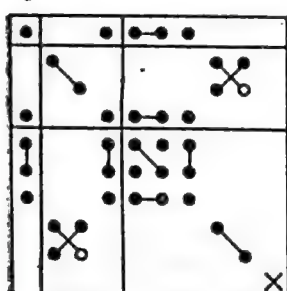


clasa $\bar{3}m$

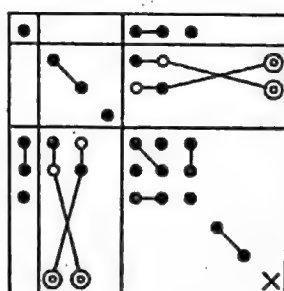


Sistemul hexagonal și texturile

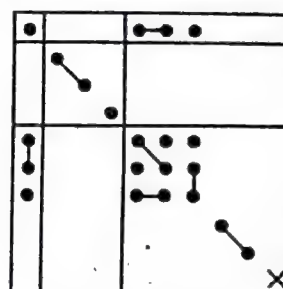
clasele 6 și ∞



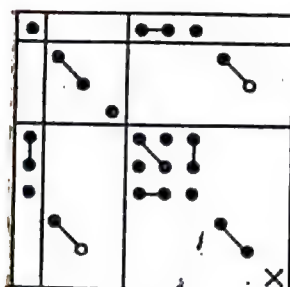
clasa $\bar{6}$



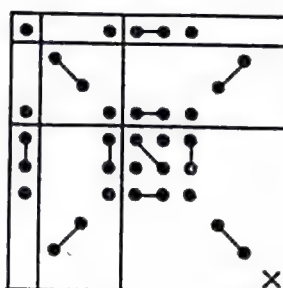
clasele 6/m, 6/mmm, ∞/m și ∞/mmm



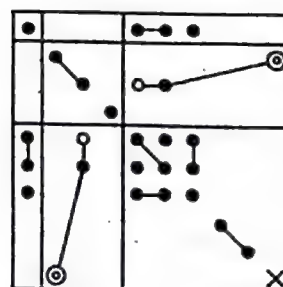
clasele 622 și $\infty 2$



clasele 6mm și ∞m

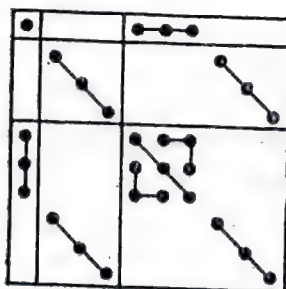


clasa $\bar{6}m2$

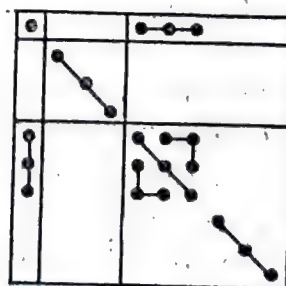


Sistemul cubic

clasele 23 și $\bar{4}3m$

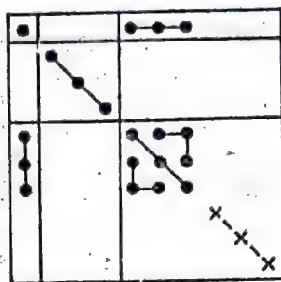


clasele m3, 432 și m3m



Corpurile izotrope și corpurile girotrope

clasele $\infty\infty m$ și
 $\infty\infty$



Notățiile

- componentă diferită de zero,
- componente egale între ele (dar diferite de zero),
- componente egale în valoare absolută, dar de semn contrar,
- ⊙ componentă egală cu dublul componentei notate cu punct (•), cu care acest semn este unit printr-o linie,
- ⊙ componentă egală cu dublul componentei luate cu semn schimbat, notată cu punct, cu care acest semn este unit printr-o linie,
- × $2(s_{11} - s_{12}) = 2(M_{44} - M_{45})$.

Toate matricele sînt simetrice față de diagonala principală.

§ 59. REZOLVAREA SIMULTANĂ A ECUAȚIILOR ELECTROSTATICII ȘI ELASTOSTATICII CRISTALELOR

Riguros vorbind, teoria elasticității și teoria electrostaticii nu pot fi aplicate separat cristalelor piezoelectrice. Orice variație a stării electrice a unui cristal piezoelectric modifică și starea lui mecanică, și invers, aceste variații trebuind să satisfacă ecuațiile electrostaticii și, respectiv, pe ale teoriei elasticității. Rezultă deci că pentru determinarea intensității și inducției cîmpului electric,

a tensiunilor și a deformațiilor dintr-un cristal, trebuie rezolvat sistemul de ecuații

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0; \quad (59.1)$$

$$\operatorname{Div} \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad \operatorname{Ink} \boldsymbol{\varepsilon} = 0 \quad (59.2)$$

cu condițiile la limită (electrice și mecanice) corespunzătoare, ținând cont de legătura dintre tensorii de câmp

$$\mathbf{D} = \kappa \cdot \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{d} + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (59.3)$$

Toemai această legătură face imposibilă rezolvarea separată, numai a unuia dintre sistemele (59.1) sau (59.2).

Rezolvarea sistemului complet de ecuații ale echilibrului electric și elastic, în funcții elementare, este posibilă numai în unele cazuri deosebit de simple. Cîteva dintre aceste cazuri, care au valoare practică și care permit, totodată, să ne dăm seama de subtilitățile problemei, vor fi examinate aici.

Lamelă piezoelectrică sub acțiunea unor tensiuni mecanice omogene. Să examinăm o lamelă cristalină, a cărei grosime, a , este mult mai mică decît lungimea și lățimea : $a^2 \ll S$; aceasta permite să neglijăm efectele de la margini. Orientarea lamelei este dată de vectorul unitar al normalei, \mathbf{n} ; vom conveni să-l considerăm orientat dinspre regiunea inferioară a lamelei spre cea superioară. Fețele perpendiculare pe \mathbf{n} sînt metalizate. Peliculei i se aplică o tensiune $\boldsymbol{\sigma}$. Să determinăm deformarea și densitatea de sarcină pe armături.

Deoarece suprafețele sînt metalizate, ele vor fi suprafețe echipotențiale. Luînd originea coordonatelor undeva pe armătura inferioară, vom introduce coordonata $z = \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}$. Este evident că toate planurile paralele cu armăturile vor fi, de asemenea, suprafețe echipotențiale, potențialul φ depinzînd numai de z , adică $\varphi = \varphi(z)$. Atunci intensitatea cîmpului electric este

$$\mathbf{E} = - \varphi' \mathbf{n},$$

unde

$$\varphi' = d\varphi/dz.$$

Asupra armăturilor lamelei acționează eforturile unitare $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ și $-\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, iar pe fețele laterale efortul $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}$, \mathbf{q} fiind normala la

porțiunea de suprafață laterală considerată. Totodată sînt valabile ecuațiile echilibrului elastic și condițiile la limită pentru tensiuni. Ecuațiile (59.3) se pot scrie acum în forma

$$\mathbf{D} = -\kappa \cdot \mathbf{n} \varphi' + 4\pi \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (59.4)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} \varphi' + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (59.5)$$

în care φ' depinde numai de z , $\boldsymbol{\sigma}$ fiind, în general, independent de coordonate. De aceea, ecuația $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ duce la $\varphi'' = 0$. Rezultă clar de aici că φ este o funcție liniară de z , ceea ce înseamnă că deformațiile sînt omogene și, deci, ecuațiile de compatibilitate a deformațiilor, $\operatorname{Ink} \boldsymbol{\varepsilon} = 0$ sînt satisfăcute identic.

În cazul în care armăturile sînt scurtcircuitate, $\varphi(0) = \varphi(a)$. Rezultă că $\varphi = \text{const}$, adică intensitatea cîmpului din lamelă este egală cu zero. Densitatea sarcinilor de pe suprafață, pe armătura inferioară este egală cu

$$\rho_{\text{supr}} = \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (59.6)$$

Pe armătura superioară ea are aceeași mărime, fiind însă de semn contrar (aceasta din cauză că normala la suprafață este orientată în sens contrar). În acest caz, deformațiile din lamelă, conform (59.5) sînt egale cu $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}$, adică sînt aceleași ca și în absența efectului piezoelectric.

În cazul unor armături izolate între ele, diferența de potențial

$$U = \varphi(0) - \varphi(a) = -a\varphi'$$

nu mai este egală cu zero și, deci, și cîmpul din lamelă va fi diferit de zero. Pe de altă parte, pentru armăturile nescurtcircuitate, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0$. Ținînd cont de aceasta, din (59.4) obținem

$$\varphi' = \frac{4\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{n} \cdot \kappa \cdot \mathbf{n}} \quad (59.7)$$

de unde deducem atît intensitatea cîmpului, $\mathbf{E} = -\varphi \mathbf{n}$, cît și diferența de potențial dintre armături, $U = -a\varphi'$. Deformațiile nu mai depind acum numai de proprietățile elastice, ci și de proprietățile piezoelectrice ale cristalului: conform relației (59.5)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{4\pi (\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{d}}{\mathbf{n} \cdot \kappa \cdot \mathbf{n}} + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}.$$

Aceasta se poate scrie sub forma

$$\varepsilon = \left[s - \frac{4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d})}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}} \right] : \boldsymbol{\sigma}. \quad (59.8)$$

Expresia din paranteză joacă rolul unui nou tensor, care va depinde de coeficienții piezoelectrice — tensorul deformabilității elastice. Evident că cu această ocazie rigiditatea lamelei crește întrucîtva; acest fapt nici măcar nu este surprinzător: lucrul sollicitărilor aplicate fețelor lamelei este cheltuit acum nu numai pentru producerea energiei de deformare elastică

$$\begin{aligned} W_{\text{elas}} &= \frac{1}{2} a \boldsymbol{\sigma} : \varepsilon = \frac{1}{2} a \boldsymbol{\sigma} : \left[s - \frac{4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d})}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}} \right] : \boldsymbol{\sigma} = \\ &= \frac{1}{2} a \boldsymbol{\sigma} : s : \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} a \frac{4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma})^2}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}} \end{aligned}$$

pe 1 cm² de lamelă, ci și pentru producerea energiei electrice (C fiind capacitatea corespunzătoare unui cm² — v. § 28)

$$W_{\text{el}} = \frac{1}{2} C U^2 = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}}{4\pi a} \left(\frac{4\pi a \mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}} \right)^2 = \frac{1}{2} a \frac{4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma})^2}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}}$$

pe fiecare centimetru pătrat. Rezultă deci că deformările se reduc exact cu atît, încît micșorarea energiei de elasticitate, determinată prin aceasta, să compenseze apariția energiei electrice.

Raportul $W_{\text{el}}/(W_{\text{elas}} + W_{\text{el}})$ dă fracțiunea din energia mecanică

$$R_{\text{mec}} = W_{\text{elas}} + W_{\text{el}}$$

consumată prin deformarea lamelei piezoelectrice, care s-a transformat în energie electrică; rădăcina pătrată din acest raport,

$$k = \sqrt{W_{\text{el}}/R_{\text{mec}}} \quad (59.9)$$

se numește *coeficientul de cuplaj electromecanic*. El poate fi adus la forma

$$k^2 = \frac{4\pi(\mathbf{E} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma})^2}{(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} : s : \boldsymbol{\sigma})}. \quad (59.10)$$

Acest raport nu depinde, evident, de mărimea câmpului electric sau de tensiunile mecanice : dacă se măresc de câteva ori toate componentele vectorului E sau ale tensorului σ , el nu se modifică. Datorită însă anizotropiei cristalului, acest raport va depinde substanțial atât de direcția câmpului electric, cât și de orientarea tensorului tensiunilor.

Practic, starea omogen tensionată a unei lamele piezoelectrice se realizează, de obicei, sub forma unei întinderi sau comprimări într-o singură direcție, care este fie perpendiculară pe peliculă (efect piezoelectric longitudinal), fie se află în planul acesteia (efect piezoelectric transversal).

În cazul efectului longitudinal tensorul tensiunilor este $\sigma = \sigma nn$. Densitatea de suprafață a sarcinii pe armăturile scurtcircuitate este :

$$\rho_{\text{supr}} = \sigma n \cdot d : nn, \quad (59.11)$$

diferența de potențial dintre armăturile nescurtecircuitate fiind

$$U = 4\pi a \sigma \frac{u \cdot d : nn}{n \cdot x \cdot n}. \quad (59.12)$$

Comparînd tensiunea σ cu variația relativă a grosimii peliculei, $n \cdot \varepsilon \cdot n$, obținem modulul lui Young, $E(n)$. În cazul armăturilor scurtcircuitate, mărimea acestuia este aceeași ca și în absența efectului piezoelectric, iar cînd armăturile nu sînt scurtcircuitate (de comparat cu (59.8)) :

$$\frac{1}{E(n)} = nn : s : nn \left[1 - \frac{4\pi(n \cdot d : nn)^2}{(n \cdot x \cdot n)(nn : s : nn)} \right]. \quad (59.13)$$

Fracția din paranteză reprezintă, evident, pătratul coeficientului de cuplaj electromecanic pentru cazul efectului piezoelectric longitudinal (a se compara cu (59.12)). Deoarece în toate formulele care exprimă efectul longitudinal, tensorul d intră numai sub forma combinațiilor $n \cdot d : nn$, el poate fi înlocuit prin tensorul efectului piezoelectric longitudinal, $f_{ijk} = f_{(ijk)}$: într-adevăr, pentru orice n avem

$$n \cdot d : nn = n \cdot f : nn.$$

Simetria tensorului f a fost studiată amănunțit în § 58.

În cazul efectului transversal, tensorul tensiunilor este $\sigma = \sigma qq$, q fiind tensorul unitar, care se află în planul lamelei. De

data aceasta, densitatea de suprafață a sarcinii pe armăturile scurtcircuitate este

$$\rho_{\text{supr}} = \sigma \mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \mathbf{q} \mathbf{q}, \quad (59.14)$$

iar diferența de potențial dintre armăturile nescurtcircuitate este

$$U = 4\pi a \sigma \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \mathbf{n} \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}}. \quad (59.15)$$

Coeficientul de cuplaj electromecanic în cazul efectului transversal

$$k^2 = \frac{4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \mathbf{q} \mathbf{q})}{(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{q} \mathbf{q} \cdot \mathbf{s} : \mathbf{q} \mathbf{q})} \quad (59.16)$$

pentru fiecare secțiune dată (adică pentru un \mathbf{n} fixat) depinde de direcția de întindere \mathbf{q} .

Lamelă piezoelectrică căreia i se aplică o diferență de potențial. Să aplicăm armăturilor aceleași lamele piezoelectrice o diferență de potențial, U . Evident, în peliculă va apărea cîmpul $\mathbf{E} = (U/a)\mathbf{n}$. Dacă lamela este liberă, adică atît pe armăturile cît și pe fața sa laterală solicitările sînt egale cu zero, atunci tensiunile vor fi egale cu zero în întreaga lamelă. În acest caz,

$$\mathbf{D} = (U/a)\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}, \quad (59.17)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (U/a)\mathbf{n} \cdot \mathbf{d}. \quad (59.18)$$

De aici deducem densitatea de sarcină pe armătura inferioară

$$\rho_{\text{supr}} = \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \frac{U}{4\pi a} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}. \quad (59.19)$$

Analoagă, din punct de vedere mecanic, lamelei cu armăturile nescurtcircuitate este o lamelă căreia i se aplică o tensiune de comprimare sau de întindere într-o singură direcție, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma \mathbf{n} \mathbf{n}$, care nu-i permite să-și modifice grosimea, astfel încît tot timpul $\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{n} \mathbf{n} = 0$. Din ecuația

$$\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{n} \mathbf{n} = (U/a) \mathbf{n} \cdot \mathbf{d} : \mathbf{n} \mathbf{n} + \sigma \mathbf{n} \mathbf{n} : \mathbf{s} : \mathbf{n} \mathbf{n} = 0,$$

obținem mărimea tensiunii

$$\sigma = - \frac{U}{a} \frac{n \cdot d : nn}{nn : s : nn}. \quad (59.20)$$

De aici vom obține formula pentru inducție

$$\mathbf{D} = \frac{U}{a} \left[\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n} - \frac{4\pi(n \cdot d : nn)d : nn}{nn : s : nn} \right],$$

pe care o putem scrie sub forma

$$\mathbf{D} = \left[\boldsymbol{\kappa} - \frac{4\pi(d : nn)(d : nn)}{nn : s : nn} \right] \cdot \mathbf{E}, \quad (59.21)$$

care este analoagă cu (59.8): expresia din paranteză are rolul noului tensor, schimbat, al permitivității dielectrice. Densitatea de sarcină de pe armături

$$\rho_{\text{supr}} = \frac{n \cdot \mathbf{D}}{4\pi} = \frac{Un \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}}{4\pi a} \left[1 - \frac{4\pi(n \cdot d : nn)^2}{(n \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot n)(nn : s : nn)} \right] \quad (59.22)$$

este mai mică decât în cazul lamelei libere, (59.19). Ca și în (59.13), micșorarea ei este dată de pătratul coeficientului raportului electromecanic, k^2 . Același coeficient, k^2 , arată ce parte anume din energia electrică este cheltuită pentru crearea diferenței de potențial a energiei electrice

$$R_{\text{el}} = \frac{1}{2} C U^2 = \frac{U}{8\pi a} n \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot n$$

trece în energie a tensiunilor mecanice,

$$W_{\text{mec}} = \frac{1}{2} a \sigma : s : \sigma$$

(ambele mărimi se referă la 1 cm² al lamelei). Într-adevăr,

$$k^2 = \frac{W_{\text{mec}}}{R_{\text{el}}} = \frac{4\pi(n \cdot d : nn)^2}{(n \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot n)(nn : s : nn)}. \quad (59.23)$$

Cristal piezoelectric sub acțiunea presiunii hidrostatice. Rezolvarea exactă a acestei probleme este posibilă numai pentru un cristal de formă sferică. Fie o sferă piezoelectrică de rază R , avînd tensorul permitivității dielectrice, κ , și cel al coeficienților piezoelectrici, d , cufundată într-un lichid izolator cu permitivitatea dielectrică κ_0 , presiunea lichidului fiind egală cu p . Atît ecuațiile echilibrului elastic, cît și condițiile la limită pentru tensiuni sînt satisfăcute dacă atît în lichid, cît și în cristal tensorul tensiunilor este

$$\sigma = -p\mathbf{I}. \quad (59.24)$$

În cadrul problemei enunțate, proprietățile piezoelectrice ale materialului sînt determinate de vectorul $\mathbf{d} = d : \mathbf{I}$, avînd componentele d_{ikk} (v. § 58). Tocmai cu acesta este coliniar vectorul momentului dipolar piezoelectric

$$\mathbf{M} = \mathbf{d} : \sigma = -pd : \mathbf{I} = -pd, \quad (59.25)$$

care, așa cum ne putem aștepta, prin analogie cu problema sferei piroelectrice (§ 31), determină potențialele cîmpului electric

$$\varphi^{(i)} = -\mathbf{r} \cdot \beta \cdot \mathbf{M}, \quad \varphi^{(e)} = (R/r)^3 \mathbf{r} \cdot \gamma \cdot \mathbf{M}$$

în cristal și, respectiv, în lichid. Tensorii constanți, β și γ , deocamdată necunoscuți, se determină, ca și în §§ 28 și 31, din condițiile la limită de continuitate ale potențialului φ și ale componente normale a vectorului \mathbf{D} , pe suprafața de separație dintre cristalul piezoelectric și lichid. Se constată că

$$\beta = -\gamma = -4\pi(\kappa + 2\kappa_0\mathbf{I})^{-1}.$$

De aici găsim intensitatea și inducția cîmpului electric din cristal

$$\mathbf{E}^{(i)} = -\text{grad } \varphi^{(i)} = 4\pi p(\kappa + 2\kappa_0\mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{d}, \quad (59.26)$$

$$\mathbf{D}^{(i)} = \kappa \cdot \mathbf{E}^{(i)} + 4\pi \mathbf{M} = -2\kappa_0 \mathbf{E}^{(i)} \quad (59.27)$$

(la deducerea expresiei (59.27) pentru inducție se utilizează același procedeu ca și în deducerea formulei (27.28)). Cunosînd pe \mathbf{E} și pe σ , este ușor să determinăm deformațiile. Vom calcula, în particular, variația relativă a volumului cristalului

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon : \mathbf{I} = -\frac{p}{K} [1 - 4\pi K \mathbf{d} \cdot (\kappa + 2\kappa_0\mathbf{I})^{-1} \cdot \mathbf{d}], \quad (59.28)$$

unde $K = (\mathbf{I} : \mathbf{s} : \mathbf{I})^{-1}$ este modulul comprimării globale, în volum (v. § 53). Și în acest caz rigiditatea cristalului crește ca urmare a efectului piezoelectric. Rolul pătratului coeficientului cuplajului electromecanic, care caracterizează această mărime, îl are aici scăzătorul din paranteza pătrată a formulei (59.28).

§ 60. POTENȚIALE TERMODINAMICE INVARIANTE ȘI NEINVARIANTE ȘI MATRICELE LOR

Energia internă, U , a unui cristal și potențialul termodinamic, Φ , sînt funcții de trei mărimi: un scalar, care caracterizează starea termică a cristalului, un vector, care caracterizează starea lui electrică, și un tensor simetric de rangul doi, care caracterizează starea lui mecanică. Pe de altă parte, în termodinamică intervin cîte două mărimi de fiecare dintre aceste tipuri: scalarii S și T , vectorii $\tilde{\mathbf{D}}$ și \mathbf{E} și tensorii $\boldsymbol{\varepsilon}$ și $\boldsymbol{\sigma}$. Energia internă, U , are rolul de potențial termodinamic al cristalului în raport cu setul $S, \tilde{\mathbf{D}}, \boldsymbol{\varepsilon}$, iar potențialul termodinamic Φ , în raport cu setul $T, \mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma}$. În total există $2^3 = 8$ seturi de acestea și, respectiv, 8 potențiale termodinamice invariante. Toate acestea se obțin din energia internă scăzînd din ea unul, două sau trei dintre produsele

$$TS, \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}, \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (60.1)$$

Invarianța lor față de grupul punctual G de simetrie al cristalului rezultă din faptul că energia internă, $U = U(S, \tilde{\mathbf{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ este invariantă față de grupul G , iar fiecare dintre produsele (60.1) este invariant față de grupul $\infty\infty m \supset G$.

Să luăm, de exemplu, potențialul $H_{el} = U - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}$, denumit *entalpie electrică*. Diferențiala lui totală este

$$dH_{el} = dU - \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathbf{D}} - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} = TdS - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (60.2)$$

de unde se vede clar că el este un potențial termodinamic în raport cu setul $S, \mathbf{E}, \boldsymbol{\varepsilon}$. Și într-adevăr, din (60.2) rezultă că

$$T = \frac{\partial H_{el}}{\partial S}, \quad \tilde{\mathbf{D}} = - \frac{\partial H_{el}}{\partial \mathbf{E}}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial H_{el}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (60.3)$$

Celelalte potențiale se obțin în mod analog. Toate aceste potențiale sînt cuprinse în tabelul 60.1. Trebuie să atragem atenția că nici

Tabelul 60.1

Cele opt potențiale termodinamice invariante

Notăția și definiția	Denumirea	Diferențiala totală
U	energia internă	$dU = TdS + \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathbf{D}} + \sigma : d\boldsymbol{\varepsilon}$
$F = U - TS$	energia liberă	$dF = -SdT + \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathbf{D}} + \sigma : d\boldsymbol{\varepsilon}$
$H_{el} = U - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}$	entalpia electrică	$dH_{el} = TdS - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} + \sigma : d\boldsymbol{\varepsilon}$
$H_{mec} = U - \sigma : \boldsymbol{\varepsilon}$	entalpia mecanică	$dH_{mec} = TdS + \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\varepsilon} : d\boldsymbol{\sigma}$
$H = U - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}} - \sigma : \boldsymbol{\varepsilon}$	entalpia	$dH = TdS + \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} - \boldsymbol{\varepsilon} : d\boldsymbol{\sigma}$
$\Phi_{mec} = U - TS - \sigma : \boldsymbol{\varepsilon}$	potențialul termodinamic	$d\Phi_{mec} = -SdT + \mathbf{E} \cdot d\tilde{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\varepsilon} : d\boldsymbol{\sigma}$
$\Phi_{el} = U - TS - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}$	potențialul termodinamic electric	$d\Phi_{el} = -SdT - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} + \sigma : d\boldsymbol{\varepsilon}$
$\Phi = U - TS - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}} - \sigma : \boldsymbol{\varepsilon}$	potențialul termodinamic	$d\Phi = -SdT - \tilde{\mathbf{D}} \cdot d\mathbf{E} - \boldsymbol{\varepsilon} : d\boldsymbol{\sigma}$

denumirile și cu atât mai mult notațiile folosite în tabel nu sînt universal acceptate (în particular, potențialul termodinamic Φ este denumit uneori energie liberă Gibbs, iar energia liberă F , energie liberă Helmholtz).

Aceleași opt potențiale sînt reprezentate în figura 60.1, care ilustrează procedeul de obținere a acestor potențiale și a legăturii dintre ele. Potențialele sînt plasate în

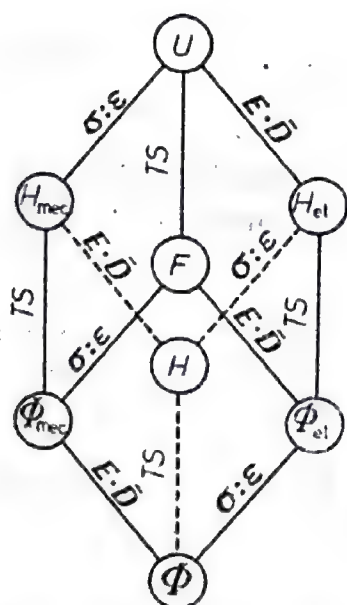


Fig. 60.1. Romboedruul potențialelor termodinamice.

virfurile unui romboedru. Virful cel mai de sus este ocupat de energia internă — potențial în raport cu coordonatele termodinamice generalizate. Mai jos sînt plasate trei virfuri, ocupate de potențialele în raport cu două coordonate și o forță. Și mai jos sînt alte trei virfuri în raport cu două forțe și o singură coordonată. În fine, virful cel mai de jos este ocupat de potențialul termodinamic Φ , funcție de forțele termodinamice generalizate. Și muchiilor li se poate atribui o semnificație fizică bine determinată: coborîrea pe muchia din față înseamnă scăderea produsului TS , coborîrea spre dreapta și în spate — scăderea produsului scalar $\mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}$, coborîrea spre stînga și în spate — scăderea produsului biscalar $\sigma : \boldsymbol{\varepsilon}$. Deplasarea în sens invers înseamnă, bineînțeles, adăugarea produselor respective. Virfurile opuse ale romboedruului sînt ocupate de potențiale în raport cu variabilele termodinamice ale seturilor complementare, de pildă, $U(S, \tilde{\mathbf{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ și $\Phi(T, \mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma})$, sau $F(T, \tilde{\mathbf{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ și $H(S, \mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma})$.

Există și potențiale termodinamice ne-invariante. Astfel sînt, de exemplu, funcția $U - \mathbf{E}_1 \tilde{D}_1$ — potențialul termodinamic în ra-

port cu $S, E_1, \tilde{D}_2, \tilde{D}_3, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$ — și funcția $U - TS - E_1\tilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$ — potențialul termodinamic în raport cu setul $T, E_1, \tilde{D}_2, \tilde{D}_3, \varepsilon_1, \sigma_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$.

Aceste potențiale depind mai mult sau mai puțin de direcție. De exemplu, potențialul $U - E_1\tilde{D}_1$ depinde de alegerea versorului e_1 : dacă el se ia altfel, acest potențial, de regulă, se schimbă. Totuși, potențialul $U - E_1\tilde{D}_1$ nu depinde de modul în care sînt aleși versorii e_1 și e_2 în planul perpendicular pe acest versor. Potențialul $U - TS - E_1\tilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$ dimpotrivă, depinde de alegerea celor doi versori, e_1 și e_2 , adică de sistemul de coordonate în întregime.

Potențialele neinvariante pot fi considerate funcții nu numai de argumentele termodinamice obișnuite, ci și de unul sau de câțiva vectori unitari, p, q, \dots . Astfel, potențialul $U - E_1\tilde{D}_1$ reprezintă o valoare particulară (pentru $p = e_1$) a potențialului $U - (E \cdot p)(\tilde{D} \cdot p)$, iar potențialul $U - TS - E_1\tilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$, o valoare particulară (pentru $p = e_1, q = e_2$) a potențialului $U - TS - (E \cdot p)(\tilde{D} \cdot p) - (\sigma : qq)(\varepsilon : qq)$.

Fie Ψ un potențial termodinamic oarecare (nu în mod obligatoriu invariant), ar ξ_1, \dots, ξ_{10} argumentele sale (y_A sau Y_A), măsurate de la starea inițială, pentru care toate forțele termodinamice Y_A sînt egale cu zero, cristalul nefiind deformat și nici polarizat. Atunci, primii termeni ai dezvoltării sale în serie Taylor sînt de forma

$$\Psi = \Psi_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi_A \partial \xi_B} \right)_0 \xi_A \xi_B + \dots \quad (60.4)$$

După cum argumentul ξ_A este coordonată termodinamică sau forță termodinamică, este valabilă una dintre expresiile

$$\xi_A = y_A, \quad Y_A = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi_A \partial \xi_B} \right) \xi_B; \quad (60.5)$$

$$\xi_A = Y_A, \quad y_A = - \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi_A \partial \xi_B} \right) \xi_B. \quad (60.6)$$

Vom numi matricea a potențialului Ψ matricea $\|(\partial^2 \Psi / \partial \xi_A \partial \xi_B)_0\|$, dacă Ψ este invariant, fiind plasat în jumătatea superioară a romboedului din figura 60.1, sau dacă Ψ este neinvariant, fiind obținut prin scăderea din U a nu mai mult de cinci produse $Y_{(A)}y_{(A)}$.

În toate celelalte cazuri, vom considera matricea a potențialului matricea $\|-(\partial^2 \Psi / \partial \xi_A \partial \xi_B)_0\|$.

Vom menționa câteva proprietăți ale unor astfel de matrice termodinamice. Toate sînt simetrice. Oricare dintre ele poate fi folosită pentru determinarea aproximativă a potențialului corespunzător, cu ajutorul formulei (60.4), a forței termodinamice (60.5) sau a coordonatei termodinamice (60.6). În sfîrșit, matricele potențialelor Ψ și Ω în raport cu seturile de argumente reciproc complementare ξ_1, \dots, ξ_{10} și $\zeta_1, \dots, \zeta_{10}$ satisfac relații de forma

$$\left\| \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi_A \partial \xi_D} \right)_0 \right\|^{-1} = \|E_{AB}\| - \left\| \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \zeta_B \partial \zeta_C} \right)_0 \right\| \|E_{CD}\|, \quad (60.7)$$

$\|E_{AB}\|$ fiind o matrice diagonală, în diagonălele căreia se află plus și minus unu

$$E_{AB} = \begin{cases} +\delta_{AB}, & \text{dacă } \xi_A = y_A, \zeta_A = Y_A; \\ -\delta_{AB}, & \text{dacă } \xi_A = Y_A, \zeta_A = y_A. \end{cases}$$

Astfel, matricea potențialului termodinamic

$$\|M_{AB}\| = \|-(\partial^2 \Phi / \partial Y_A \partial Y_B)_0\|$$

introdusă în § 57, determină în primă aproximație potențialul termodinamic

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{1}{2} M_{AB} Y_A Y_B \quad (60.8)$$

și dependența coordonatelor termodinamice de forțele termodinamice

$$y_A = M_{AB} Y_B. \quad (60.9)$$

Matricea energiei interne,

$$\|N_{AB}\| = \|(\partial^2 U / \partial y_A \partial y_B)_0\|$$

joacă un rol analog

$$U = U_0 + \frac{1}{2} N_{AB} y_A y_B, \quad (60.10)$$

$$Y_A = N_{AB} y_B; \quad (60.11)$$

evident că ea este inversa matricei potențialului termodinamic : $N = M^{-1}$; în acest caz (și numai în acesta) E este pur și simplu matricea unitate.

Într-o scriere mai detaliată, formula (60.11) capătă forma

$$\Theta = (T_0/C_v) \Sigma - (T_0/C_v) q_k \tilde{D}_k - (T_0/C_v) \beta_\mu \varepsilon_\mu, \quad (60.12, a)$$

$$E_i = - (T_0/C_v) q_i \Sigma + 4\pi \eta_{ik} \tilde{D}_k - h_{i\mu} \varepsilon_\mu, \quad (60.12, b)$$

$$\sigma_\lambda = - (T_0/C_v) \beta_\lambda \Sigma - h_{k\lambda} \tilde{D}_k + c_{\lambda\mu} \varepsilon_\mu \quad (60.12, c)$$

(literele a, b, c din numerotarea formulelor se referă, respectiv, la mărimile termice, electrice și mecanice). În aceste formule C_v este căldura specifică raportată la unitatea de volum pentru deformări constante și inducție constantă, η_{ik} este impermitivitatea dielectrică adiabatică pentru deformări constante, $c_{\lambda\mu}$ sînt coeficienții adiabatici ai elasticității în cazul inducției constante, β_λ sînt coeficienții de termoelasticitate pentru cazul inducției constante, q_i și $h_{i\mu}$ sînt vectorul și, respectiv, tensorul, care descriu proprietățile piroelectrice și piezoelectrice ale unui cristal și care nu au nici o denumire general acceptată (denumirea de „constantă lui Mason” pentru $h_{i\mu}$ nu a căpătat, după cît se pare, o răspîndire prea largă).

Drept un al doilea exemplu să examinăm potențialul $H_{el}(S, \mathbf{E}, \boldsymbol{\varepsilon})$. Din relația (60.3) obținem

$$\Theta = \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S^2} \right)_0 \Sigma + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S \partial \mathbf{E}} \right)_0 \cdot \mathbf{E} + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S \partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right)_0 : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (60.13, a)$$

$$\tilde{\mathbf{D}} = - \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \mathbf{E} \partial S} \right)_0 \Sigma - \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}} \right)_0 \cdot \mathbf{E} - \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \mathbf{E} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right)_0 : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (60.13, b)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial S} \right)_0 \Sigma + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \mathbf{E}} \right)_0 \cdot \mathbf{E} + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right)_0 : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (60.13, c)$$

sau, în formă matriceală,

$$\begin{pmatrix} \Theta \\ -\tilde{\mathbf{D}} \\ \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\partial^2 H_{el}/\partial S^2)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial S \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial S \partial \boldsymbol{\varepsilon})_0 \\ (\partial^2 H_{el}/\partial \mathbf{E} \partial S)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \mathbf{E} \partial \boldsymbol{\varepsilon})_0 \\ (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial S)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon})_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Sigma \\ \cdot \mathbf{E} \\ : \boldsymbol{\varepsilon} \end{pmatrix}. \quad (60.13)$$

Potențialul în raport cu setul complementar de argumente este $\Phi_{\text{mec}}(T, \tilde{\mathbf{D}}, \sigma)$; pentru matricea sa ecuația, analoagă relației (60.13) este de forma

$$\begin{pmatrix} \Sigma \\ -\mathbf{E} \\ \epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T^2)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T \partial \sigma)_0 \\ -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial T)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial \sigma)_0 \\ -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial T)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial \sigma)_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta \\ \tilde{\mathbf{D}} \\ \sigma \end{pmatrix} \quad (60.14)$$

Comparând (60.13) cu (60.14) vedem că matricile potențialelor H_{el} și Φ_{mec} sînt legate, în deplină concordanță cu ecuația (60.7), prin relația

$$\begin{pmatrix} -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T^2)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial T \partial \sigma)_0 \\ -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial T)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \tilde{\mathbf{D}} \partial \sigma)_0 \\ -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial T)_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial \tilde{\mathbf{D}})_0 & -(\partial^2 \Phi_{\text{mec}} / \partial \sigma \partial \sigma)_0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial S^2)_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial S \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial S \partial \epsilon)_0 \\ (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \mathbf{E} \partial S)_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \mathbf{E} \partial \epsilon)_0 \\ (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \epsilon \partial S)_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \epsilon \partial \mathbf{E})_0 & (\partial^2 H_{\text{el}} / \partial \epsilon \partial \epsilon)_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (60.15)$$

Unele elemente ale matricelor din formulele (60.13) și (60.14) sînt nu numai numere, ci și vectori și tensori; în particular, două dintre cele trei unități din matricele \mathbf{E} ale formulei (60.15) sînt tensori.

§ 61. DEPENDENȚA COEFICIENȚILOR TERMODINAMICI DE CONDIȚIILE DE MĂSURARE

După cum se știe, coeficienții care caracterizează proprietățile substanțelor depind — și uneori substanțial — de condițiile în care acestea sînt măsurate: căldura specifică măsurată la volum constant nu este egală cu căldura specifică măsurată la presiune constantă; comprimarea adiabatică nu este egală cu cea izotermică.

Cristalele nu fac excepție de la aceste reguli : astfel, proprietățile mecanice ale unui cristal depind de condițiile electrice în care se află cristalul (armăturile scurtcircuitate sau nescurtcircuitate ale lamelei piezoelectrice), iar proprietățile electrice — de condițiile mecanice (lamela poate sau nu să se deformeze liber).

Vom pleca de la sistemul coeficienților termodinamici, generat de potențialul termodinamic Φ , adică de la ecuațiile de definiție (relațiile (60.12))

$$\Sigma = \frac{C_p}{T_0} \Theta + p_k E_k + \alpha_\mu \sigma_\mu, \quad (61.1, a)$$

$$\tilde{D}_i = p_i \Theta + \frac{1}{4\pi} \kappa_{ik} E_k + d_{i\mu} \sigma_\mu, \quad (61.1, b)$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta + d_{k\lambda} E_k + s_{\lambda\mu} \sigma_\mu. \quad (61.1, c)$$

Coeficienții κ_{ik} , $s_{\lambda\mu}$, $d_{i\mu}$ se măsoară la temperatura constantă. Să calculăm valorile acestor coeficienți cînd sînt determinați în condiții adiabatică, și nu în condiții izotermice.

În cazul unui proces adiabatic, entropia este constantă, iar temperatura variază. Variația ei se obține ușor din ecuația (61.1, a)

$$\Theta = \frac{T_0}{C_p} \Sigma - \frac{T_0}{C_p} p_k E_k - \frac{T_0}{C_p} \alpha_\mu \sigma_\mu \quad (61.2, a)$$

(pentru generalitate nu considerăm aici $\Sigma = 0$, avînd în vedere că entropia poate să se mențină constantă, dar nu egală cu S_0). Să înlocuim valoarea obținută a lui Θ în ecuațiile (61.1, b) și (61.1, c)

$$\begin{aligned} \tilde{D}_i = \frac{T_0}{C_p} p_i \Sigma + \left(\frac{1}{4\pi} \kappa_{ik} - \frac{T_0}{C_p} p_i p_k \right) E_k + \\ + \left(d_{i\mu} - \frac{T_0}{C_p} p_i \alpha_\mu \right) \sigma_\mu, \end{aligned} \quad (61.2, b)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_\lambda = \frac{T_0}{C_p} \alpha_\lambda \Sigma + \left(d_{k\lambda} - \frac{T_0}{C_p} p_k \alpha_\lambda \right) E_k + \\ + \left(s_{\lambda\mu} - \frac{T_0}{C_p} \alpha_\lambda \alpha_\mu \right) \sigma_\mu. \end{aligned} \quad (61.2, c)$$

De aici căpătăm valorile adiabatică ale coeficienților

$$\begin{aligned}\kappa_{ik}^{(S)} &= \kappa_{ik} - \frac{4\pi T_0}{C_p} p_i p_k, \quad s_{\lambda\mu}^{(S)} = s_{\lambda\mu} - \frac{T_0}{C_p} \alpha_\lambda \alpha_\mu, \\ d_{i\mu}^{(S)} &= d_{i\mu} - \frac{T_0}{C_p} p_i \alpha_\mu.\end{aligned}\quad (61.3)$$

Așadar, permitivitatea dielectrică adiabatică și coeficienții piezo-electrici adiabatici se deosebesc de cei izotermici numai în cazul cristalelor piroelectrice. Cu toate că unii coeficienți adiabatici ai deformabilității elastice se deosebesc de coeficienții izotermici corespunzători, practic, pentru toate corpurile, la toate cristalele cu o simetrie suficient de înaltă, o parte dintre coeficienții adiabatici coincid cu cei izotermici (de exemplu, în cazul cristalelor cubice $s_{44}^{(S)} = s_{44}$). Formulele (61.3) mai arată că coeficienții adiabatici diagonali ai permitivității dielectrice (κ_{11} , κ_{22} , κ_{33}) și ai deformabilității elastice (s_{11} , s_{22} , ..., s_{66}) nu sînt mai mari decît coeficienții izotermici de același nume; această afirmație, ca și alte inegalități termodinamice, este valabilă într-un sistem arbitrar de coordonate.

Formulele (61.2) definesc, de fapt, matricea termodinamică pentru entalpia $H = \Phi + TS$, care este un potențial termodinamic în raport cu variabilele S , E , σ . Mai mult decît atît, elementele acestei matrice se exprimă prin mărimi ce pot fi bine măsurate experimental, și anume, elementele matricei M .

Evident, în cazul în care se face substituția uneia dintre variabilele independente, totdeauna se poate acționa într-un mod asemănător. Să examinăm acum cazul în care se face substituția nu a unei singure variabile independente, ci a trei variabile independente simultan: să calculăm coeficienții C_p , $s_{\lambda\mu}$ și α_λ , nu pentru cazul în care cîmpul electric este constant, ca în ecuațiile (61.1), ci în cazul în care inducția este constantă. În acest scop să rezolvăm sistemul de ecuații (61.1, b) în raport cu componentele vectorului E . Să calculăm mai întîi tensorul $\eta^* = \kappa^{-1}$ — tensorul impermitivității dielectrice, măsurat într-un proces izotermic și pentru tensiuni constante. Cu ajutorul acestui tensor găsim

$$E_k = -4\pi\eta_{ki}^* p_i \Theta + 4\pi\eta_{ki}^* \tilde{D}_i - 4\pi\eta_{ki}^* d_{i\mu} \sigma_\mu, \quad (61.4, b)$$

iar apoi, substituind această expresie în (61.1, a) și (61.1, c) obținem

$$\Sigma = (C_p/T - 4\pi\eta_{ki}^* p_k p_i) \Theta + 4\pi\eta_{ki}^* p_k \tilde{D}_i + (\alpha_\mu - 4\pi\eta_{ki}^* p_k d_{i\mu}) \sigma_\mu, \quad (61.4, a)$$

$$\varepsilon_\lambda = (\alpha_\lambda - 4\pi\eta_{ki}^* p_i d_{k\lambda}) \Theta + 4\pi\eta_{ki}^* d_{k\lambda} \tilde{D}_i + (s_{\lambda\mu} - 4\pi\eta_{ki}^* d_{k\lambda} d_{i\mu}) \sigma_\mu. \quad (61.4, c)$$

Ecuatiile (61.4) determină o matrice care corespunde potențialului termodinamic

$$\Phi_{\text{mec}} = \Phi + \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}}.$$

Se observă că coeficienții termodinamici, în cazul unei inducții constante, diferă de coeficienții analogi pentru un câmp electric constant, numai în cazul cristalelor piroelectrice (\mathcal{C}_p și α_λ) și al celor piezoelectrice ($s_{\lambda\mu}$).

Calcularea erorilor care apar la trecerea de la coeficienții izotermici la cei adiabatici și de la coeficienții mășurați în câmp constant la coeficienții mășurați pentru inducție constantă arată că la majoritatea covârșitoare a cristalelor (însă aceasta nu se referă la cristalele seignettoelectrice), erorile sînt mici, cea mai mare fiind de ordinul a 1%. Excepție fac coeficienții piroelectrici mășurați în cazul unei deformări constante și în cazul unei tensiuni constante: diferența dintre ele este de același ordin ca și coeficienții înșiși. Pentru a o determina calculăm, din ecuația

$$s_{\lambda\mu} c_{\mu\nu}^* = \delta_{\lambda\nu}$$

coeficienții $c_{\lambda\mu}^*$ — coeficienții de elasticitate pentru un proces izotermic în câmp electric constant. Rezolvînd cu ajutorul acestor coeficienți ecuația (61.1, c) în raport cu σ_μ , găsim

$$\sigma_\mu = -c_{\mu\nu}^* \alpha_\nu \Theta - c_{\mu\nu}^* d_{k\nu} E_k + c_{\mu\nu}^* \varepsilon_\nu \quad (61.5, c)$$

și înlocuind pe σ_μ în (61.1, a) și (61.1, b), obținem

$$\Sigma = \left(\frac{C_p}{T} - c_{\mu\nu}^* \alpha_\mu \alpha_\nu \right) \Theta + (p_k - c_{\mu\nu}^* \alpha_\mu d_{k\nu}) E_k + c_{\mu\nu}^* \alpha_\mu \varepsilon_\nu, \quad (61.5, a)$$

$$\tilde{D}_i = (p_i - d_{i\mu} c_{\mu\nu}^* \alpha_\nu) \Theta + (\tilde{z}_{ik} - d_{i\mu} c_{\mu\nu}^* d_{k\nu}) E_k + d_{i\mu} c_{\mu\nu}^* \varepsilon_\nu. \quad (61.5, b)$$

Prin urmare, coeficienții piroelectrici pentru o deformare constantă sînt egali cu

$$p_i^{(e)} = p_i - d_{i\mu} c_{\mu\nu}^* \alpha_\nu. \quad (61.6)$$

În cazul tuturor cristalelor piroelectrice, coeficienții mășurați pentru o tensiune constantă se deosebesc într-o anumită măsură de coeficienții mășurați în cazul unor deformări constante, deoarece toate cristalele piroelectrice sînt cristale piezoelectrice.

În condițiile obișnuite ale experiențelor din fizică sau ale aplicațiilor tehnice ale cristalelor, de regulă nu există posibilitatea aplicării asupra unui cristal a tuturor forțelor termodinamice pe care ni le putem imagina. Dacă, de exemplu, un cristal se utilizează sub formă de lamelă dielectrică într-un condensator plan, intensitatea câmpului electric din interiorul său este perpendiculară pe planul lamelei. Dispozitivele cu care se face solicitarea permit, la rândul lor, de obicei, să se obțină numai unele configurații particulare ale tensiunilor; în cazul special al lamelei, acestea pot fi, de pildă, tensiuni de comprimare și de întindere, orientate după normala \mathbf{n} la planul lamelei, sau după o direcție oarecare \mathbf{q} , perpendiculară pe această normală (\mathbf{n} și \mathbf{q} fiind vectorii unitari). În aceste condiții, potențialul termodinamic al cristalului depinde, în fond, numai de cele trei variabile (T , \mathbf{E} , σ), nu de zece, ca în cazul general. Este evident că și toate celelalte potențiale termodinamice vor trebui să fie determinate, în acest caz, numai de cele trei variabile independente corespunzătoare, cu toate că, în general, sînt diferite de zero toate componentele vectorului inducție și ale tensorului deformărilor. De fapt, deosebit de importantă, fiind esențială, este numai o singură componentă a vectorului inducție ($\tilde{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n}$) și tot o singură componentă a tensorului deformărilor ($\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}$ sau $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{q}$), toate celelalte sînt univoc determinate de către ele (împreună cu temperatura sau entropia).

Să examinăm, de exemplu, efectul piroelectric într-o lamelă cristalină tăiată astfel încît vectorul coeficienților piroelectrici să fie normal la planul lamelei, adică $\mathbf{p} = p\mathbf{n}$. Dacă armăturile sînt scurtcircuitate și lamelei nu i se aplică nici un fel de tensiuni, atunci coordonatele termodinamice generalizate sînt egale cu

$$\Sigma = (C_p/T_0) \Theta, \quad (61.7, a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \tilde{\mathbf{D}} = p\Theta, \quad (61.7, b)$$

$$\mathbf{nn} : \boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{nn} : \boldsymbol{\alpha}) \Theta. \quad (61.7, c)$$

Densitatea de sarcină pe o armătură este egală cu

$$\rho_{\text{supr}} = \mathbf{n} \cdot \tilde{\mathbf{D}} = p\Theta, \quad (61.8)$$

din care se și determină coeficientul piroelectric p pentru tensiunile constante (și egale cu zero).

Să aplicăm acum lamelei o tensiune de comprimare, $\sigma = \sigma \mathbf{nn}$, astfel încît grosimea ei să nu se modifice prin creșterea tempera-

turii. Cîmpul electric în lamelă, ca și pînă acum, este egal cu zero, astfel încît

$$\Sigma = (C_p/T_0) \Theta + (\alpha : nn) \sigma, \quad (61.9, a)$$

$$n \cdot \tilde{D} = p\Theta + (n \cdot d : nn) \sigma, \quad (61.9, b)$$

$$nn : \varepsilon = (nn : \alpha) \Theta + (nn : s : nn) \sigma. \quad (61.9, c)$$

Întrucît grosimea lamelei rămîne neschimbată, $nn : \varepsilon = 0$ și din (61.9, c) deducem

$$\sigma = - \frac{nn : \alpha}{nn : s : nn} \Theta, \quad (61.10, c)$$

iar înlocuindu-l pe σ în (61.9, a) și (61.9, b), vom avea încă două ecuații

$$\Sigma = \left[\frac{C_p}{T_0} - \frac{(nn : \alpha)^2}{nn : s : nn} \right] \Theta, \quad (61.10, a)$$

$$n \cdot \tilde{D} = \left[p - \frac{(nn : \alpha)(n \cdot d : nn)}{nn : s : nn} \right] \Theta. \quad (61.10, b)$$

Evident, rolul de coeficient piezoelectric îl are, în aceste condiții, coeficientul lui Θ din ecuația (61.10, b); este firesc să-l notăm cu $p_{(nn : \varepsilon)}$. Subliniem faptul că acesta nu este coeficientul piezoelectric pentru deformări constante: sînt constante componenta tensorului deformațiilor, $nn : \varepsilon$, precum și toate componentele tensorului tensiunilor, diferite de $nn : \sigma$.

Analiza altor experiențe asemănătoare se efectuează analog. Ca și în exemplul examinat, totdeauna este necesar să se urmărească cu atenție care anume componente ale vectorilor E și \tilde{D} ale tensorilor σ și ε rămîn constante în condițiile experienței.

Să calculăm acum elementele matricei entalpiei electrice, H_{el} ; ele ne vor fi necesare în § 62 pentru calcularea corecțiilor piezoelectrice ale vitezelor de propagare a undelor elastice în cristale. Deoarece elementele de matrice ale entalpiei, H , au fost deja deduse (v. relațiile (61.2)), vom pleca de la definiția

$$H_{el} = H + \sigma_\lambda \varepsilon_\lambda.$$

Va trebui deci să începem cu calcularea matricei inverse lui $s_{\lambda\mu}^{(S)}$ (v. (61.3)), adică cu rezolvarea sistemului de ecuații

$$[s_{\lambda\mu} - (T_0/C_p) \alpha_\lambda \alpha_\mu] c_{\mu\kappa}^{(E)} = \delta_{\lambda\kappa} \quad (61.11)$$

în raport cu $c_{\mu\kappa}^{(E)}$ care sînt coeficienții de elasticitate adiabatici la intensitatea constantă a cîmpului electric. Aceasta permite rezolvarea în raport cu σ_λ a ecuației (61.2, c)

$$\sigma_\lambda = -(T_0/C_p) c_{\lambda\mu}^{(E)} \alpha_\mu \Sigma - c_{\lambda\mu}^{(E)} d_{k\mu}^{(S)} E_k + c_{\lambda\mu}^{(E)} \varepsilon_\mu. \quad (61.12, c)$$

Coeficienții lui Σ , E_k , ε_μ formează cele șase linii inferioare ale matricei entalpiei electrice. Celelalte elemente ale sale vor fi obținute înlocuind relația (61.12, c) în (61.2, a) și (61.2, b) și grupînd coeficienții lui Σ , E_k și ε_λ

$$\begin{aligned} \Theta &= (T_0/C_p)[1 + (T_0/C_p) \alpha_\lambda c_{\lambda\mu}^{(E)} \alpha_\mu] \Sigma - \\ &- (T_0/C_p)(p_k - \alpha_\lambda c_{\lambda\mu}^{(E)} d_{k\mu}^{(S)}) E_k - (T_0/C_p) \alpha_\lambda c_{\lambda\mu}^{(E)} \varepsilon_\mu, \end{aligned} \quad (61.12, a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D}_i &= (T_0/C_p)(p_i - d_{i\lambda}^{(S)} c_{\lambda\mu}^{(E)} \alpha_\mu) \Sigma + \\ &+ (\tilde{x}_{ik}^{(S)} - d_{i\lambda}^{(S)} c_{\lambda\mu}^{(E)} d_{k\mu}^{(S)}) E_k + d_{i\lambda}^{(S)} c_{\lambda\mu}^{(E)} \varepsilon_\mu. \end{aligned} \quad (61.12, b)$$

Acești coeficienți vor și forma cele patru linii superioare ale matricei căutate; trebuie numai înmulțite liniile care corespund vectorului \tilde{D} cu -1 (v. formulele (60.13)).

Pentru un proces adiabatic, $\Sigma = 0$, formulele (61.12, c) putînd fi scrise sub forma

$$\tilde{D}_i = \tilde{x}_{ik}^{(S, E)} E_k + e_{i\mu} \varepsilon_\mu, \quad (61.13)$$

$$\sigma_\lambda = -e_{k\lambda} E_k + c_{\lambda\mu}^{(E)} \varepsilon_\mu;$$

coeficienții termodinamici nou introduși sînt legați de derivatele secunde ale potențialului termodinamic prin relațiile (61.11) și prin

$$\begin{aligned} \tilde{x}_{ik}^{(S, E)} &= x_{ik} - d_{i\lambda} c_{\lambda\mu}^{(E)} d_{k\mu} - (T_0/C_p) p_i p_k + \\ &+ (T_0/C_p)(p_i \alpha_\lambda c_{\lambda\mu}^{(E)} d_{k\mu} + d_{i\lambda} c_{\lambda\mu}^{(E)} \alpha_\mu p_k) - (T_0/C_p)^2 p_i \alpha_\lambda c_{\lambda\mu}^{(E)} \alpha_\mu p_k, \end{aligned} \quad (61.14)$$

$$e_{i\mu} = [d_{i\lambda} - (T_0/C_p) p_i \alpha_\lambda] c_{\lambda\mu}^{(E)}. \quad (61.15)$$

Exemplele analizate arată că determinând experimental elementele unei singure matrice termodinamice, se pot apoi calcula toate celelalte matrice termodinamice. Astfel, calculând tensorul

$$\eta = [\kappa^{(S, \varepsilon)}]^{-1},$$

în care $\kappa^{(S, \varepsilon)}$ este setul coeficienților lui E din formula (61.1, b), putem să-l exprimăm pe E în funcție de Σ , \tilde{D} și ε , și înlocuind apoi valoarea găsită pentru E în (61.1, a) și (61.1, c) să-i exprimăm sub formă de funcții de Σ , \tilde{D} și ε și de Θ și σ . Comparând expresiile obținute cu formulele (60.12) coeficienții termodinamici T_0/C_v , η_{ik} , $c_{\lambda\mu}$, β_λ , q_i și $h_{i\mu}$, care sînt derivatele de ordinul doi ale energiei interne, se pot exprima prin derivatele de ordinul doi ale potențialului termodinamic, C_p/T_0 , χ_{ik} , $s_{\lambda\mu}$, p_i , α_λ , $d_{i\mu}$. Practic însă lucrurile nici pe departe nu sînt atît de simple. Datele experimentale au o precizie limitată. Deja prin calculul făcut pe baza datelor experimentale pentru elementele primei matrice termodinamice precizia se micșorează substanțial, în cadrul calculelor ulterioare scăzînd tot mai mult. Din această cauză, făcînd astfel de calcule este necesar să se evalueze cu precauție precizia rezultatelor obținute. În scopul micșorării erorilor, este bine să se plece nu de la minimul necesar de date experimentale, ci de la un sistem excedentar de date. Desigur, în acest caz, calculele se complică, însă rezultatele lor sînt mai veridice. Metodica unor astfel de calcule, luînd special ca exemplu tocmai calcule cristalografice, a fost descris de Nye (1967).

§ 62. UNDE ELASTICE ÎN CRISTALELE PIEZOELECTRICE

Pentru studiul particularităților de propagare a undelor elastice în cristalele piezoelectrice trebuie analizate soluțiile sistemului reunit al ecuațiilor elastodinamicii și al ecuațiilor electrostaticii. Folosindu-ne de ecuațiile electrostaticii în locul ecuațiilor elastodinamicii, comitem desigur o eroare; ca ordin de mărime, aceasta este egală cu pătratul raportului dintre viteza sunetului în cristal și viteza luminii, deci complet neglijabilă.

Sistemul pe care trebuie să-l rezolvăm este următorul

$$\text{Div } \sigma = \rho \ddot{u}, \quad (62.1)$$

$$\text{div } D = 0. \quad (62.2)$$

Ecuațiile $\text{rot } E = 0$ și $\text{Ink } \varepsilon = 0$ pot fi satisfăcute identic dacă tensorul tensiunilor, σ , și vectorul inducției electrice, D , sînt expri-

mați prin potențialul φ și vectorul deplasare, \mathbf{u} . Pentru aceasta trebuie să folosim matricea acelui potențial termodinamic, care să fie funcție de vectorul intensitate a cimpului electric, $\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi$, de tensorul deformațiilor $\boldsymbol{\varepsilon} = \text{Def } \mathbf{u}$ și, în fine, de entropia, S , dat fiind că propagarea undelor elastice este un proces adiabatic. Un asemenea potențial termodinamic este potențialul

$$H_{e1} = U - \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{D}},$$

studiat amănunțit în paragraful precedent. Expresiile deduse acolo, (61.13), este convenabil să fie transcrise în forma

$$D_i = -\chi_{ik}^{(S, \varepsilon)} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + 4\pi e_{ikl} \frac{\partial \mu_k}{\partial x_l}, \quad (62.3)$$

$$\sigma_{ij} = e_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + c_{ijkl}^{(E)} \frac{\partial \mu_k}{\partial x_l} \quad (62.4)$$

(în formulele care urmează, în loc de $\chi_{ik}^{(S, \varepsilon)}$ și $c_{ijkl}^{(E)}$ vom scrie χ_{ik} și c_{ijkl}). Aici tensorul $\boldsymbol{\varepsilon} = \text{Def } \mathbf{u}$ este înlocuit cu tensorul $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r}$, pentru că prin înmulțirea cu tensorii \mathbf{c} și \mathbf{e} , simetrici în raport cu ultimii doi indici, ambii dau rezultate asemănătoare. Componentele e_{ikl} ale tensorului \mathbf{e} sînt legate de coeficienții $e_{i\mu}$ prin relațiile (v. anexa F)

$$e = e_{ikl} \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6).$$

Substituind expresiile (62.4) și (62.3) în ecuațiile (62.1) și respectiv, (62.2), obținem un sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale, de ordinul doi, în raport cu funcțiile $u_i(\mathbf{r}, t)$ și $\varphi(\mathbf{r}, t)$

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_k \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}, \quad (62.5)$$

$$-\chi_{ik} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} + 4\pi e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} = 0. \quad (62.6)$$

Utilizînd notațiile din § 56 și notînd cu $A\xi$ amplitudinea potențialului, vom scrie undele plane de deplasare și cele ale potențialului, intim legate între ele

$$\mathbf{u} = A\mathbf{p} \exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r} - vt)],$$

$$\varphi = A\xi \exp[2\pi i/\lambda(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r} - vt)].$$

Înlocuindu-le în ecuațiile (62.5) și (62.6), obținem

$$M_{jk}p_k + \xi g_j = \rho v^2 p_j, \quad \mathbf{M} \cdot \mathbf{p} + \xi \mathbf{g} = \rho v^2 \mathbf{p}; \quad (62.7)$$

$$- \xi K + 4\pi g_k p_k = 0, \quad - \xi K + 4\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{p} = 0, \quad (62.8)$$

unde introducem notațiile

$$M_{jk} = e_{ijkl} m_i m_l, \quad \mathbf{M} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{m};$$

$$g_k = e_{ikl} m_i m_l, \quad \mathbf{g} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{m};$$

$$K = \kappa_{il} m_i m_l, \quad K = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{m}.$$

Prin urmare, pe lângă tensorul Christoffel, \mathbf{M} (v. § 56), aici se introduce vectorul \mathbf{g} și scalarul K , analogi tensorului \mathbf{M} . Din (62.8) obținem

$$\xi = \frac{4\pi}{K} g_k p_k = \frac{4\pi}{K} \mathbf{g} \cdot \mathbf{p}$$

și, înlocuind aceasta în (62.7), deducem

$$\left(M_{jk} + \frac{4\pi}{K} g_j g_k \right) p_k = \rho v^2 p_j, \quad \left(\mathbf{M} + \frac{4\pi}{K} \mathbf{g} \mathbf{g} \right) \cdot \mathbf{p} = \rho v^2 \mathbf{p}. \quad (62.9)$$

Este potrivit ca acest sistem de ecuații să se numească ecuațiile Christoffel ale cristalului piezoelectric. Așadar, toată deosebirea față de cazul undelor elastice s-a redus pentru cristalul piezoelectric la înlocuirea tensorului Christoffel obținut, \mathbf{M} , cu tensorul $\mathbf{M} + (4\pi/K) \mathbf{g} \mathbf{g}$.

Să examinăm, spre exemplu, propagarea undelor elastice într-un cristal din clasa 2, de-a lungul unei axe de ordinul doi, X_2 . Calculul componentelor tensorului \mathbf{M} se simplifică foarte mult datorită faptului că în acest caz $M_{jk} = c_{2jk2}$. De aici (v. tabelul E.18)

$$M_{11} = c_{66}, \quad M_{22} = c_{22}, \quad M_{33} = c_{44},$$

$$M_{23} = 0, \quad M_{31} = c_{46}, \quad M_{12} = 0.$$

Componentele vectorului \mathbf{g} sint, în acest caz, egale cu $g_j = c_{2j2}$. Conform tabelului E.11

$$g_1 = 0, \quad g_2 = c_{22}, \quad g_3 = 0.$$

În sfârșit, $K = \kappa_{22}$. Ecuațiile Christoffel, (62.9), capătă forma

$$\begin{aligned} c_{66}p_1 + c_{46}p_3 &= \rho v^2 p_1, \\ (c_{22} + 4\pi e_{22}^2/\kappa_{22})p_2 &= \rho v^2 p_2, \\ c_{44}p_1 + c_{44}p_3 &= \rho v^2 p_3. \end{aligned}$$

În cadrul lor este clar că în acest caz se schimbă numai viteza undelor longitudinale, devenind egală cu

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} \left(c_{22} + \frac{4\pi e_{22}^2}{\kappa_{22}} \right)} \approx v_0 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{4\pi e_{22}^2}{\kappa_{22} c_{22}} \right),$$

unde v este viteza calculată fără considerarea efectului piezoelectric. Raportul $4\pi e_{22}^2/(\kappa_{22} c_{22})$ joacă aici rolul pătratului coeficientului cuplajului electromecanic.

Drept un al doilea exemplu, ceva mai complicat, vom examina propagarea undelor elastice într-un cristal din clasa m , după direcția normalei la planul de simetrie; aceasta va fi din nou axa X_2 . Tensorul M și scalarul K sînt calculați deja în exemplul precedent. Componentele vectorului g sînt, ca și mai înainte, egale cu $g_j = e_{2j2}$, însă acum, din tabelul E.11, găsim

$$g_1 = e_{26}, \quad g_2 = 0, \quad g_3 = e_{24}.$$

Din această cauză, ecuațiile Christoffel capătă forma

$$\begin{aligned} \left(c_{66} + \frac{4\pi e_{26}^2}{\kappa_{22}} \right) p_1 + \left(c_{46} + \frac{4\pi e_{26}e_{24}}{\kappa_{22}} \right) p_3 &= \rho v^2 p_1, \\ c_{22}p_2 &= \rho v^2 p_2, \\ \left(c_{46} + \frac{4\pi e_{26}e_{24}}{\kappa_{22}} \right) p_1 + \left(c_{44} + \frac{4\pi e_{24}^2}{\kappa_{22}} \right) p_3 &= \rho v^2 p_3. \end{aligned}$$

Este clar că în acest caz corecția piezoelectrică a vitezei undelor longitudinale este egală cu zero, schimbîndu-se însă vitezele și direcțiile de polarizare ale undelor transversale.

§ 63. INEGALITĂȚI TERMODINAMICE

Într-un proces ireversibil entropia corpului variază nu numai datorită transferului acesteia de la corpurile înconjurătoare către corpul considerat, sau invers, ci și datorită faptului că entropia ia naștere în corpul însuși. Aceasta se exprimă prin inegalitatea

$$\frac{dS}{dt} - \frac{1}{T} \frac{dQ}{dt} \geq 0, \quad (63.1)$$

care reprezintă una dintre formulările posibile ale principiului al doilea al termodinamicii. Pe de altă parte, conform principiului întâi al termodinamicii, viteza transferului de căldură este

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dU}{dt} - E \cdot \frac{d\tilde{D}}{dt} - \sigma : \frac{d\epsilon}{dt}. \quad (63.2)$$

Utilizând faptul că temperatura absolută, T , este pozitivă, din (63.1) și (63.2) obținem inegalitatea

$$\frac{dU}{dt} - T \frac{dS}{dt} - E \cdot \frac{d\tilde{D}}{dt} - \sigma : \frac{d\epsilon}{dt} = \frac{dU}{dt} - X_A \frac{dx_A}{dt} \leq 0. \quad (63.3)$$

Dacă sistemul nu se află în stare de echilibru termodinamic potențialul termodinamic $\Phi = U - X_A x_A$ depinde nu numai de forțele termodinamice generalizate, X_A , ci și de alte argumente, astfel încât viteza sa de variație, când forțele termodinamice sînt constante, este egală cu

$$\left(\frac{d\Phi}{dt} \right)_X = \frac{d}{dt} (U - X_A x_A)_X = \frac{dU}{dt} - X_A \frac{dx_A}{dt}. \quad (63.4)$$

Comparînd această relație cu (63.3), obținem

$$\left(\frac{d\Phi}{dt} \right)_X \leq 0 \quad (63.5)$$

adică pentru forțe termodinamice constante, potențialul termodinamic Φ al sistemului de neechilibru se micșorează, iar al sistemului de echilibru rămîne neschimbat. Cu alte cuvinte, starea de echilibru termodinamic se deosebește de toate celelalte stări ale unei substanțe, definite prin aceleași forțe termodinamice generalizate, prin aceea că în starea de echilibru potențialul termodinamic atinge valoarea sa minimă; așa că orice abateri posibile față de această valoare trebuie să fie pozitive

$$(\delta\Phi)_X > 0. \quad (63.6)$$

Cînd se compară potențialul termodinamic al unei stări de echilibru cu potențialele termodinamice ale unor stări de neechilibru, vecine stării de echilibru, este necesar să se țină cont că stările de

necchilibru nu sînt determinate numai prin definirea celor 10 forțe generalizate, ci depind și de alți parametri. Dacă asemenea parametri vor fi coordonatele generalizate, atunci

$$(\delta\Phi)_X = \delta(U - X_A x_A)_X = \frac{\partial U}{\partial x_A} \delta x_A + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B} \delta x_A \delta x_B - X_A \delta x_A.$$

Funcția U se dezvoltă în serie pînă la termenii de ordinul doi, deoarece termenii de ordinul întîi se reduc reciproc

$$\frac{\partial U}{\partial x_A} - X_A = 0.$$

Prin urmare, din (63.6) rezultă inegalitatea

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B} \delta x_A \delta x_B > 0. \quad (63.7)$$

Riguros vorbind, pentru ca să fie satisfăcută condiția (63.6) este suficient ca forma pătratică

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B} \delta x_A \delta x_B$$

să nu fie negativă, iar pentru valorile lui x_A pentru care ea se anulează să fie egală cu zero forma de ordinul trei și pozitivă forma de ordinul patru. Forma pătratică devine zero în punctul critic. Excludem acest caz din studiu, astfel încît toate concluziile ulterioare sînt adevărate în presupunerea că starea cristalului nu este critică.

Dacă derivatele parțiale $\partial^2 U / \partial x_A \partial x_B$ se calculează pentru $y_A = 0$ ($A = 0, \dots, 9$), atunci ele trec în elementele matricei termodinamice, N . Din această cauză, drept caz particular al inegalității (63.7) trebuie să fie adevărată inegalitatea

$$N_{AB} \delta x_A \delta x_B > 0. \quad (63.8)$$

Întrucît creșterile δx_A sînt arbitrare, pentru ca inegalitatea (63.8) să fie adevărată este necesar ca matricea N să fie pozitiv definită.

După cum se știe, o matrice pozitiv definită are totdeauna o matrice inversă, aceasta fiind, la rîndul ei, de asemenea, definită pozitiv. Așadar, și matricea M este definită pozitiv.

Conform teoremei lui Silvestre toți minorii principali ai matricelor pozitiv definite sînt pozitivi. Se numesc *minori principali*

ai unei matrice determinantul matricei însăși și toți determinanții obținuți din matrice prin omiterea liniilor și coloanelor cu același ordin (de exemplu, omiterea primei linii și a primei coloane, sau a ultimelor trei linii și a ultimelor trei coloane etc.). În particular, este minor principal orice element care se află pe diagonala principală a matricei. Din această cauză, în matricele termodinamice M și N toți coeficienții care se află pe diagonala principală sînt esențial pozitivi

$$C_p > 0, \quad C_v > 0,$$

$$\kappa_{11} > 0, \quad \kappa_{22} > 0, \quad \kappa_{33} > 0, \quad \eta_{11} > 0, \quad \eta_{22} > 0, \quad \eta_{33} > 0,$$

$$s_{11} > 0, \quad s_{22} > 0, \quad s_{33} > 0, \quad c_{11} > 0, \quad c_{22} > 0, \quad c_{33} > 0, \quad (63.9)$$

$$s_{44} > 0, \quad s_{55} > 0, \quad s_{66} > 0, \quad c_{44} > 0, \quad c_{55} > 0, \quad c_{66} > 0.$$

(în primele două inegalități este folosit faptul că temperatura absolută nu poate fi decît pozitivă). Valorile componentelor tensorilor, la trecerea de la un sistem de coordonate la altul, se schimbă. Deoarece în cadrul demonstrației sistemul de coordonate nu a fost fixat, aceste inegalități sînt adevărate în orice sistem.

De aici rezultă, în particular, că componentele normale $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{q}$ și $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{q}$ sînt pozitive pentru orice \mathbf{q} . Într-adevăr, luînd ca vector unitar versorul \mathbf{e}_1 al unui sistem de coordonate oarecare, obținem în acest sistem

$$\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{q} = \kappa_{11} \quad \text{și} \quad \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{q} = \eta_{11}.$$

Analog se deduce și caracterul pozitiv al modulului Young, $E(\mathbf{q})$, și al modulului de forfecare la torsiune, $G(\mathbf{q})$, pentru orice vector unitar, \mathbf{q} .

Să examinăm acum minorii principali de ordinul doi. Caracterul lor pozitiv înseamnă că elementele nediagonale ale matricelor M și N trebuie să fie mărginite în valoare absolută. De exemplu, din

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{22} \end{vmatrix} > 0$$

rezultă

$$s_{12}^2 < s_{11}s_{22}. \quad (63.10)$$

Analog obținem

$$\kappa_{12}^2 < \kappa_{11}\kappa_{22}. \quad (63.11)$$

Această condiție limitează chiar și valoarea absolută a coeficienților de dilatare termică, a coeficienților piroelectrici și piezoelectrici. Astfel, din

$$\begin{vmatrix} C_p/T_0 & \alpha_1 \\ \alpha_1 & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

rezultă pentru coeficientul de dilatare termică inegalitatea

$$\alpha_1^2 < \frac{C_p s_{11}}{T_0}. \quad (63.12)$$

Analog se deduc inegalitățile pentru coeficienții piroelectrici și piezoelectrici; de exemplu,

$$p_1^2 < \frac{C_p \kappa_{11}}{4\pi T_0}, \quad (63.13)$$

$$d_{14}^2 < \frac{\kappa_{11} s_{44}}{4\pi}. \quad (63.14)$$

Prin același procedeu se obțin inegalitățile pentru coeficienții adiabatici — elemente ale matricei N ; de exemplu,

$$c_{12}^2 < c_{11}c_{22}, \quad (63.15)$$

$$\eta_{12}^2 < \eta_{11}\eta_{22}, \quad (63.16)$$

$$\beta_1^2 < \frac{T c_{11}}{C_v}, \quad (63.17)$$

$$q_1^2 < \frac{4\pi T \eta_{11}}{C_v}, \quad (63.18)$$

$$h_{12}^2 < 4\pi \eta_{11}c_{22}. \quad (63.19)$$

Sensul fizic al acestor coeficienți rezultă din formulele (60.12), tot acolo fiind date și denumirile lor.

Modul în care se folosesc minorii principali de ordinul trei pentru deducerea inegalităților termodinamice îl vom examina luând ca exemplu proprietățile elastice ale cristalelor sistemului cubic și ale corpurilor izotrope.

Caracterul pozitiv al minorilor principali de ordinul întâi dă rezultatul deja cunoscut

$$s_{11} > 0 \quad (63.20)$$

Faptul că minorii principali de ordinul doi, care, pentru cristalele sistemului cubic au forma

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

sînt pozitivi, duce la inegalitatea

$$s_{11}^2 > s_{12}^2;$$

pe care, ținînd cont de (63.20), o putem scrie sub forma

$$-s_{11} < s_{12} < s_{11}. \quad (63.21)$$

Condiția pentru ca minorul principal de ordinul trei, pentru cristalele sistemului cubic, să fie pozitiv

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

sau, ceea ce este același lucru,

$$s_{11}^2 + 2s_{12}^2 - 3s_{11}s_{12} > 0,$$

după descompunerea în factori a părții stîngi, relația capătă forma

$$(s_{11} - s_{12})^2 (s_{11} + 2s_{12}) > 0.$$

De unde rezultă că

$$s_{11} + 2s_{12} > 0$$

sau

$$s_{12} > -s_{11}/2,$$

ceea ce permite o precizare esențială a inegalității (63.21)

$$-\frac{1}{2}s_{11} < s_{12} < s_{11}. \quad (63.22)$$

Pentru descrierea proprietăților elastice ale corpurilor izotrope se folosește, de obicei, modulul Young, $E = 1/s_{11}$, și coeficientul Poisson, $\nu = -s_{12}/s_{11}$. Din (63.22) rezultă inegalitatea cunoscută pentru coeficientul Poisson al corpurilor izotrope

$$-1 < \nu < \frac{1}{2}. \quad (63.23)$$

Inegalitățile care rezultă din faptul că minorii de ordinul doi și de ordine mai mari sînt pozitivi, pot fi scrise, de asemenea, într-o formă invariantă. De exemplu, din inegalitatea

$$4\pi d_{11}^2 < \kappa_{11}s_{11}$$

rezultă că în cazul în care vectorul unitar q este arbitrar

$$4\pi(q \cdot d : qq)^2 < (q \cdot \kappa \cdot q)(qq : s : qq); \quad (63.24)$$

inegalitate care arată că coeficientul cuplajului electromecanic pentru efectul piezoelectric longitudinal după orice direcție este mai mic ca unitatea. Este ușor de demonstrat că toți coeficienții posibili ai cuplajului electromecanic pentru orice orientare arbitrară a cîmpului electric și tensiunilor mecanice sînt, de asemenea, subunitari.

§ 64. SCHIMBAREA SIMETRIEI CRISTALELOR ÎN CAZUL UNOR TRANZIȚII DE FAZĂ DE SPEȚA A DOUA

Sînt cunoscute suficient de multe substanțe chimice, care pot exista în cîteva modificații cristaline; fiecare modificare este stabilă într-un interval termic bine definit. În cazul variației temperaturii, aceste substanțe suferă tranziții de fază. În majoritatea cazurilor, acestea sînt *tranziții de speța întâi*, în care se produce variația în salturi a structurii cristaline, această variație corespunzînd, la rîndul ei, unei variații în salturi a stării substanței.

Însă tranzițiile de fază dintre două stări alotropice cristaline diferite (adică avînd simetrii diferite) ale unei aceleiași substanțe

se pot produce și altfel. Este vorba despre faptul că pentru un singur caz particular de modificare a simetriei, și anume, pentru micșorarea acesteia, este suficientă o deplasare oricât de mică a particulelor din punctele poziției particulare în care se aflau inițial.

Așadar, o deplasare oricât de mică a particulelor, care se află în centrele de simetrie ale unei structuri cristaline, determină pierderea de către structură a centrelor de simetrie. Dacă particulele care se află pe axe de simetrie sau în planurile de simetrie se deplasează de pe aceste axe sau planuri, structura își pierde aceste elemente de simetrie; ea le păstrează numai în cazul în care deplasările particulelor se produc în planul de simetrie sau de-a lungul axei de simetrie.

Astfel de tranziții de fază, în care modificarea simetriei cristalului se produce ca urmare a unei variații infinit mici a structurii lui, ceea ce face ca starea corpului să se modifice continuu, nu în salturi, se numesc *tranziții de fază de speța a doua*.

În realitate, firește, niciodată nu putem fi siguri că deplasarea atomilor care provoacă micșorarea gradului de simetrie este infinit mică; se poate afirma numai că aceasta este într-atât de mică încât precizia aparatelor pe care le avem este insuficientă pentru a sesiza saltul. Cu toate acestea, chiar dacă uneori sesizăm într-o anumită stare un salt, constatăm însă că el este mic; în aceste cazuri se spune că tranziția de fază, chiar dacă este de speța întâi, este apropiată de o tranziție de fază de speța a doua. Astfel este, de exemplu, tranziția de fază din titanatul de bariu. Să o examinăm mai amănunțit.

În figura 64.1 este reprezentată structura unei modifiții cubice a titanatului de bariu, BaTiO_3 . Grupul ei spațial este $Pm\bar{3}m$, iar cel punctual, $m\bar{3}m$. Această modifiție există la o temperatură mai mare de 120°C . La o temperatură mai mică de 120°C , atomii de titan și de oxigen încep să se deplaseze față de atomii de bariu în direcția uneia dintre muchiile cubului.

Este complet evident că de îndată ce începe această deplasare, simetria cristalului scade dintr-o dată: a grupului spațial până la $P4mm$, iar a grupului punctual până la $4mm$. Așadar, la această temperatură se produce trecerea titanatului de bariu în modifi-

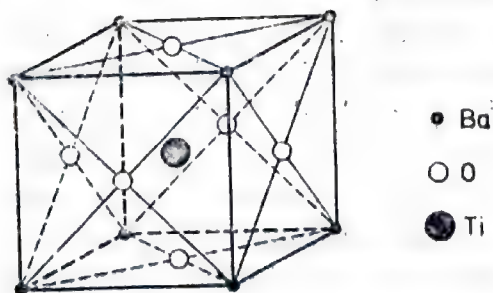
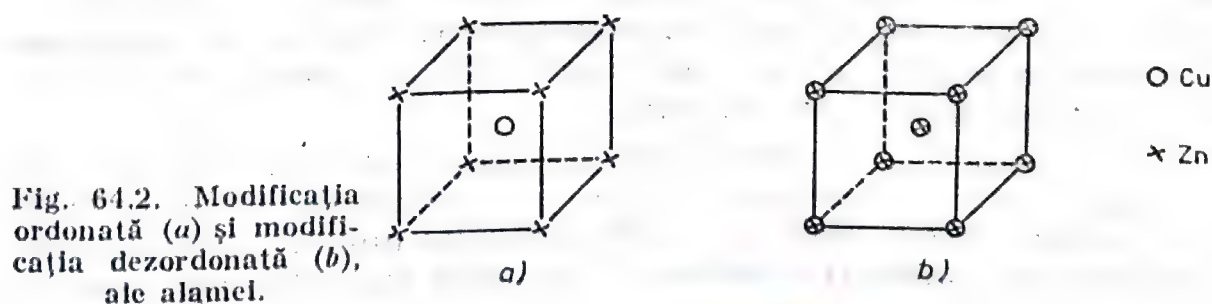


Fig. 64.1. Structura modifiției cubice a titanatului de bariu.

cația tetragonală. La temperaturi apropiate de temperatura tranziției de fază, abaterea structurii de la structura cubică este foarte mică. Dacă temperatura scade în continuare, abaterea de la structura cubică se mărește treptat, dar chiar și la temperatura camerei, adică la o temperatură cu 100°C mai mică decât temperatura tranziției, deplasările maxime ale atomilor de la poziția lor „cubică” nu depășesc 0,03 din parametrul celulei, iar raportul dintre axe, c/a , diferă de unitate cu și mai puțin.

În titanatul de bariu micșorarea simetriei este determinată de deplasarea atomilor; de aceea, asemenea tranziții se mai numesc *tranziii de tip deplasare*. Exact același mecanism al micșorării simetriei acționează și în tranzițiile de fază de speța a doua de tipul „ordine-dezordine”. Să le investigăm, luând ca exemplu tranziția de speța a doua din aliajul CuZn.

La temperaturi suficient de înalte, acest aliaj (fig. 64.2) reprezintă o structură cubică centrată intern (structură de tip α -Fe): atomii de cupru și de zinc ocupă, cu exact aceeași probabilitate, nodurile unei rețele cubice Bravais centrată intern; grupul spațial al acestei structuri este $Im\bar{3}m$. La o anumită scădere a temperaturii devine însă mai stabilă din punct de vedere termodinamic acea distribuție a atomilor care, în prima sferă de coordonare a unui atom dat, este mai probabil să întâlnească un atom de cealaltă specie, decât un atom de același fel. Tocmai în acest moment simetria cristalului se modifică, cu toate că schimbarea aranjării relative a atomilor este extrem de neînsemnată. Tendința fiecărui atom de a se înconjura cu vecini, cei mai apropiați, cu precădere din cealaltă specie, face ca, dacă ne-am imagina o bucată nu prea mare (totuși macroscopică) din structura cristalină desfășurată în cele două rețele cubice simple implantate una în alta, în nodurile uneia dintre subrețele să se afle cu precădere atomii de o anumită specie, iar în nodurile celei de a doua subrețele, atomii de celălalt fel. Aceasta înseamnă însă că subrețelele sînt neechivalente din punct de vedere al simetriei: structura și-a pierdut translațiile, care uneau virfurile cuburilor cu centrele lor. Așadar, în urma unei variații complet neglijabile a distribuției atomilor, simetria de translație s-a redus



la jumătate; rețeaua Bravais a noii structuri, parțial ordonate, este cubică primitivă, grupul spațial fiind $Pm\bar{3}m$.

Subliniem faptul că chiar o deosebire total neînsemnată a probabilităților de a se găsi în nodurile subrețelei date atomi de specii diferite, este suficientă pentru micșorarea menționată a simetriei. La o scădere în continuare a temperaturii, aceste probabilități se diferențiază tot mai mult, ordonarea cristalului crește și ea, apropiindu-se de o ordonare perfectă, când o subrețea este populată cu atomi de o anumită specie, iar cealaltă numai cu atomi de cealaltă specie. De data aceasta însă simetria cristalului nu se mai schimbă: atît în cazul unui cristal complet ordonat, cît și a unuia cu o ordonare incipientă, grupul spațial este același, $Pm\bar{3}m$, și numai în cazul unui cristal complet dezordonat ea este mai înaltă, și anume, $Im\bar{3}m$.

Exemplele analizate arată cum, pentru o variație oricît de mică a structurii, se modifică simetria în salt. Pe lângă aceasta, aceste exemple ne ajută să înțelegem că modificările legate între ele prin tranziții de fază de speța a doua nu sînt egale între ele: una dintre ele are simetrie superioară față de cealaltă. Vom numi prima modificare modificare *simetrică*, iar pe cea de-a doua *disimetrică*.

Prin urmare, grupul spațial al modificății disimetrice este un subgrup al grupului spațial al modificății simetrice. În afară de această condiție, grupurile spațiale ale modificățiilor cristaline, legate printr-o tranziție de fază de speța a doua, trebuie să mai satisfacă și alte cîteva condiții (v. § 66).

Inegalitatea dintre modificarea simetrică și cea disimetrică apare deosebit de pregnant în faptul că structura modificății disimetrice, pe măsura apropierii temperaturii de punctul tranziției de fază, T_c , se apropie tot mai mult de structura modificății simetrice, iar odată cu îndepărtarea de T_c , se abate tot mai mult de la modificăția simetrică; dimpotrivă, în structura modificății simetrice situația este inversă: pînă la punctul de tranziție nu se produce nici o schimbare care s-o apropie de structura modificății disimetrice (subliniem faptul că este vorba numai despre structură: în faza simetrică, pe măsura apropierii de punctul Curie, apar indicii care pun în evidență aceasta — v. Brout, 1967 — nefiind vorba de o modificare a structurii). Exprimîndu-ne metaforic, modificăția simetrică „se rușinează” de înrudirea ei cu modificăția disimetrică, pe cînd modificăția disimetrică nu se jenează deloc de această înrudire.

În tabelul 64.1 sînt date cîteva exemple de tranziții de fază de speța a doua sau apropiate de ele. În cazurile simple, examinate mai sus, micșorarea simetriei era determinată numai de deplasarea atomilor sau numai de ordonare; în unele tranziții, așa cum se

Tabelul 64.1

Unele tranziții de fază de speța a doua și unele tranziții apropiate de ele

Substanța		Temperatura de tranziție, °C	Modificarea simetrică		Modificarea disimetrică		Măsurarea simetriei			Caracterul tranziției
denumirea	formula		Grupul spațial	clasa	Grupul spațial	clasa	derotație	de tran-	totală	
Titanat de bariu	BaTiO_3	120	$Pm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	$P4mm$	$4mm$	6	1	6	depl, sg, sl
Sare Seignette	$\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	24, -18	$P2_12_12$	222	$P2_1$	2	2	1	2	or + depl, sg
Sulfat triglicinic	$(\text{CH}_2\text{NH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$	49	$P2_1/m$	$2/m$	$P2_1$	2	2	1	2	or + depl, sg
Dihidrofostat de potasiu (KDP)	KH_2PO_4	-151	$I42d$	$\bar{4}2m$	$Fdd2$	$mm2$	2	1	2	or + depl, sg
Hexaferocianură de potasiu trihidrată	$\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	-25	$C2/c$	$2/m$	Cc	m	2	1	2	or + depl, sg
Sulfat de amoniu	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	-49	$Pnam$	mmm	$Pna2_1$	$mm2$	2	1	2	sg, sl
Propionat de calciu și stronțiu	$\text{CaSr}(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO})_2$	8,5	$\{P4_32_12, P4_12_12\}$	422	$\{P4_3, P4_1\}$	4	2	1	2	sg
Dihidrofostat de amoniu (ADP)	$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$	-125	$I42d$	$\bar{4}2m$	$P2_12_12$	222	2	2	4	or + depl
Trioxid de wolfram	WO_3	900	$Pm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	$P4/nmm$	$4/nmm$	3	2	6	depl
Cuarț	SiO_2	573	$\{P6_222, P6_122\}$	622	$\{P3_121, P3_221\}$	32	2	1	2	depl
Salpetru de sodiu	NaNO_3	275,5	$R\bar{3}m$	$\bar{3}m$	$R3c$	3m	1	2	2	or
Alamă	CuZn	450	$Im\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	$Pm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	1	2	2	or
Aliaj Heussler	Cu_2MnAl		$Im\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	$Fm\bar{3}m$	$m\bar{3}m$	1	4	4	or

Prescurtările: depl — tranziție care este însoțită de deplasarea atomilor; or — tranziție legată de ordonare; sg — tranziție seignetteelectrică; sl — tranziție de speța întâi.

vede din tabel, acționează concomitent ambele mecanisme (se obișnuiește să se considere că factorul inițiator în asemenea tranziții îl constituie ordonarea, deplasarea atomilor fiind doar o consecință a ordonării).

În coloana care conține micșorarea simetriei de rotație este trecut numărul care arată de câte ori se micșorează această simetrie printr-o tranziție, mai precis, subgrupul fiecărui indice constituie grupul punctual al fazei mai puțin simetrice în raport cu grupul punctual al fazei mai simetrice. În coloana următoare se indică de câte ori se micșorează simetria de translație în timpul tranziției, adică de câte ori crește volumul celulei elementare (mai exact, numărul de atomi din ea). În fine, numărul din a treia coloană, egal cu produsul dintre numerele din prima și din cea de a doua coloană, desemnează un subgrup al cărui indice îl reprezintă grupul spațial al modificăției disimetrice în raport cu grupul spațial al modificăției simetrice. În tabel sînt date exemple de tranziții pentru care variază numai simetria de rotație (cuarț, titanat de bariu, sare Seignette, sulfat triglicinic, dihidrofosfat de potasiu), sau numai simetria de translație (aliajele care se ordonează, salpetru de sodiu) și, în sfîrșit, exemple de tranziții pentru care variază și simetria de rotație și cea de translație (dihidrofosfat de amoniu, trioxid de wolfram).

Foarte răspîndit și totodată important din punct de vedere practic, tipul de tranziții de fază de speța a doua, care se produc fără variația simetriei de translație (Indenbom, 1960). În figura 64.3 sînt reprezentate toate variantele

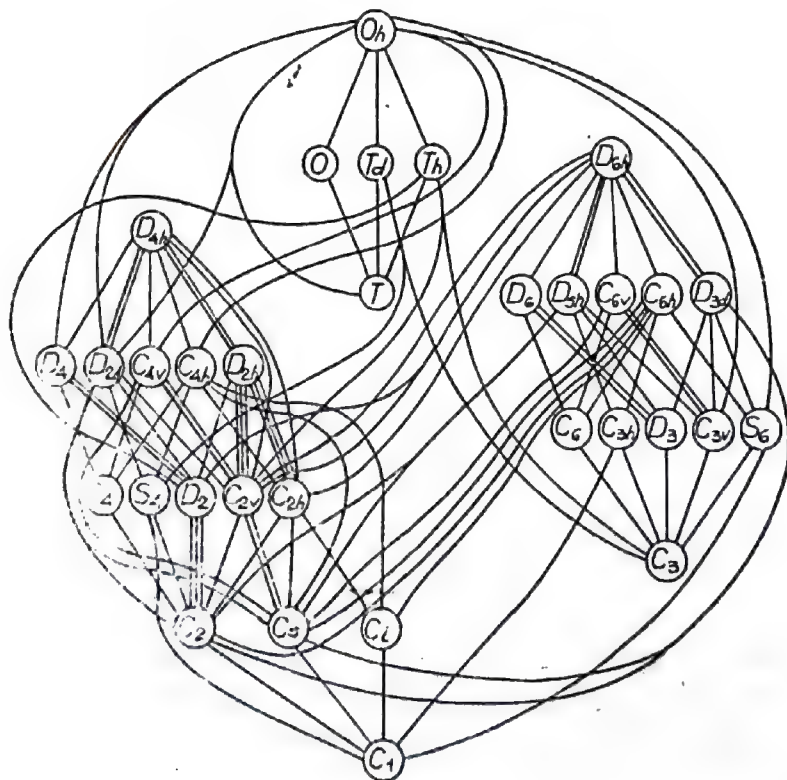


Fig. 64.3. Modificarea simetriei cristalelor în cazul transformărilor de fază de speța a doua, care se produc fără schimbarea numărului de atomi din celula elementară. Liniile unesc clasele cristalografice între care este posibilă transformarea. Dreptele indică faptul că simetria se modifică în transformare de două ori, liniile curbate, mai mult de două ori, liniile duble și cele triple, că transformarea se poate realiza în două sau trei moduri (Indenbom, 1960).

posibile de schimbare a simetriei pentru tranzițiile de acest tip. În total există 90 variante de acest fel; pentru 58 dintre ele este caracteristică micșorarea ordinului grupului punctual de două ori, pentru 9 — de patru ori, pentru 19 — de șase ori și pentru 4 variante — de opt ori.

În majoritatea cazurilor, la temperaturi coborâte corespund modificării ordonate, mai puțin simetrice, la temperaturi ridicate — modificării mai simetrice, dezordonate; această regulă empirică nu este însă îndeplinită totdeauna. De exemplu, modificarea disimetrică a sării Seignette trece în modificarea simetrică, nu numai prin creșterea temperaturii la 24°C , ci și prin scăderea acesteia la -18°C .

Dacă grupul spațial al modificării disimetrice este un subgrup de indice n în raport cu grupul modificării simetrice, atunci modificarea mai simetrică poate trece în cea mai puțin simetrică prin n moduri. În cazul unor astfel de tranziții, cristalul se separă, de regulă, în porțiuni care se numesc *domenii*, în fiecare dintre acestea tranziția realizându-se într-un anumit mod; în total iau naștere n tipuri de domenii. Operațiile de simetrie care intră într-un grup spațial al modificării disimetrice transformă fiecare domeniu în el însuși. Operațiile de simetrie care intră însă în grupul spațial al modificării simetrice, dar care nu fac parte din grupul spațial al modificării disimetrice, cu alte cuvinte, operațiile de simetrie pe care cristalul le pierde prin translație, transformă un domeniu de un anumit tip într-un domeniu de alt tip.

Dacă în cadrul tranziției simetria de translație a cristalului se conservă, atunci un domeniu de un anumit tip se transformă într-un domeniu de alt tip prin câteva rotații simple, sau rotații cu inversie, și anume prin acelea care s-au pierdut prin tranziție. Dacă însă în cadrul tranziției variază numai simetria de translație, nu și cea de rotație, atunci domeniile de diferite tipuri se transformă unul într-altul nu prin rotații, ci tot prin acele translații care au fost pierdute în cadrul tranziției. Se poate spune că în primul caz domeniile de un anumit tip sînt răsucite față de domeniile celui-lalt tip, iar în al doilea caz sînt deplasate față de ele. Aceste cazuri sînt ilustrate în figura 64.4.

Tranzițiile de fază de speța a doua, în cadrul cărora simetria cristalului se micșorează, contravin, la prima vedere, principiului Curie. Acest principiu afirmă că atunci „cînd în anumite fenomene se constată apariția unor anumite disimetrii, aceleași disimetrii trebuie să fi fost și în cauzele care le-au generat” (P. Curie, 1966, p. 102); în acest caz însă micșorarea simetriei cristalului se produce datorită variației temperaturii, cauză evident, care nu prezintă deloc disimetria cerută. Rezolvarea acestui paradox constă în faptul că în medie simetria cristalului nu se micșorează nicidecum în cadrul acestei tranziții. Într-un volum care conține suficient de multe domenii sînt reprezentate totodată în proporție aproximativ egală toate modurile posibile de tranziție, adică toate tipurile posibile de domenii; deci simetria sa va

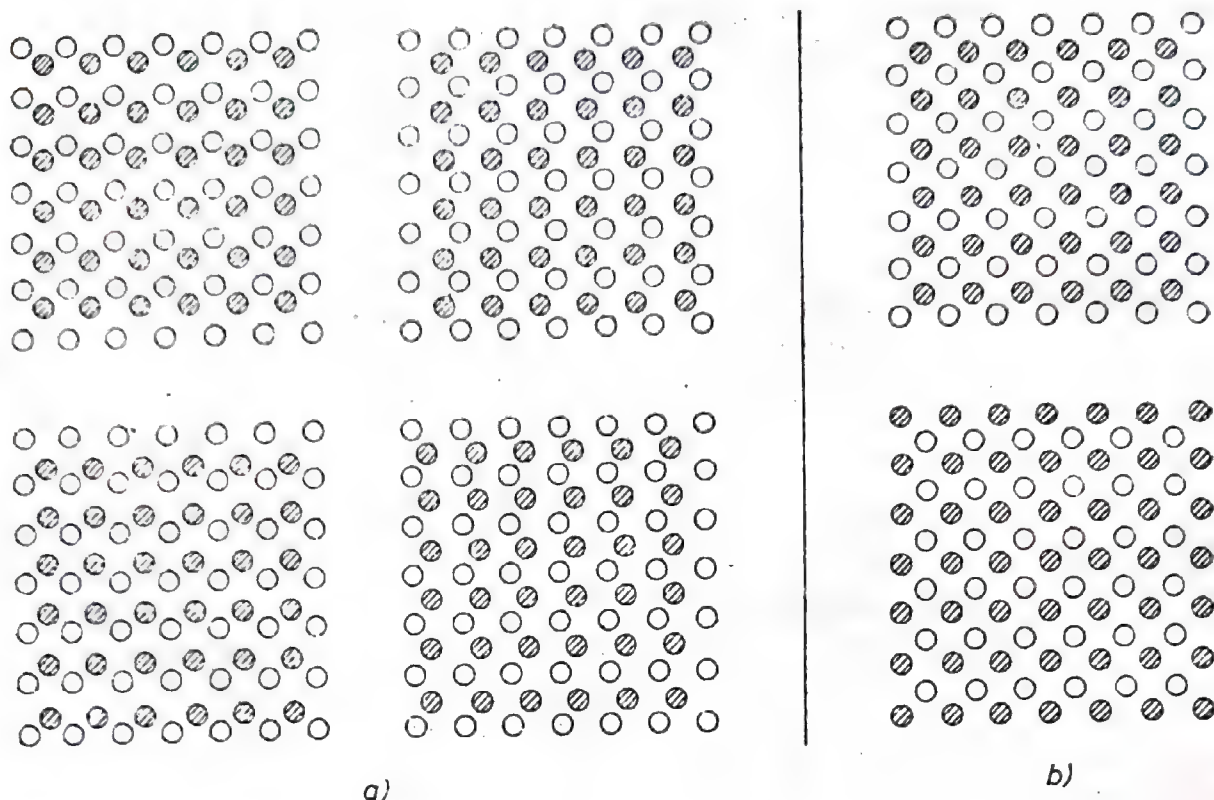


Fig. 64.4. Schema împărțirii unui cristal în domenii în cazul unei transformări de fază de speța a doua : a) analogul bidimensional al transformării din titanatul de bariu — patru tipuri de domenii care se transformă unul în altul prin rotația cu 90° (în realitate în acest caz se transformă șase tipuri de domenii) ; b) analogul bidimensional al transformării din aliajul CuZn — două tipuri de domenii, care se transformă unul în altul la translațiile suferite la transformare (într-o transformare reală se formează două tipuri de domenii).

fi după tranziție aceeași ca și înainte de tranziție (din această cauză vorbind despre simetria unei modificări disimetrice, ne referim totdeauna nu la simetria unui polidomeniu al acestei modificări, ci la simetria unui singur domeniu al cristalului. Se poate întâmpla că datorită tranziției să se obțină cristale monodomeniale. Analizând o cantitate suficient de mare de cristale care au suferit tranziția ne vom convinge că simetria mulțimii lor, ca un întreg, așa cum și era de așteptat, nu a scăzut datorită variației temperaturii.

Exemplul tranzițiilor de fază ale modificărilor cristaline mai simetrice în altele mai puțin simetrice demonstrează că există cazuri în care principiul Curie nu este aplicabil direct unui obiect luat separat, însă obiectul dat poate fi considerat drept un element al unui anumit ansamblu statistic, pentru care principiul Curie este perfect satisfăcut.

Principiul Curie, care interzice unele fenomene, nici pe departe nu impune ca fenomenele permise de el să se producă într-adevăr; astfel, el interzice ca în cristalele cu simetrie internă (cu centru de simetrie) să se manifeste proprietăți piezoelectrice, însă din aceasta nu rezultă neidecum că în cristalele care nu au centru de simetrie asemenea proprietăți trebuie să apară în mod obligatoriu. Aici poate fi ușor sesizată analogia cu principiile termodinamicii, care, de asemenea, interzic unele fenomene, fără a cere însă ca fenomenele permise de ele să se producă neapărat în realitate. Analogia dintre principiul Curie și principiile termodinamicii nu se limitează numai la cele de mai sus; din exemplele de tranziții de fază de speța a doua, vedem că principiul Curie, ca și principiul al doilea al termodinamicii, are un carac-

ter statistic. Însă trăsătura principală, care leagă principiul Curie de principiile termodinamicii, este generalitatea sa maximă; ca și principiile termodinamicii, principiul Curie nu reprezintă de fapt o lege fizică, ci una dintre cele mai generale legi ale naturii. Tocmai de aceea Marie Curie, în concluziile la sinteza lucrărilor lui Pierre Curie din domeniul teoriei simetriei și al fizicii cristalelor, vorbește despre „deosebita valoare filozofică a noțiunilor de simetrie, care pătrund în esența tuturor fenomenelor naturii ...” (M. Curie, 1968, p. 25).

§ 65. MODIFICAREA PROPRIETĂȚILOR FIZICE ALE CRISTALELOR ÎN URMA TRANZIȚIILOR DE FAZĂ DE SPEȚA A DOUA

Pentru descrierea unui cristal care suferă o tranziție de fază de speța a doua, L. D. Landau (1937) (v. Landau și Lifșitș, 1964, p. 506) a introdus mărimea η , care definește gradul de abatere al distribuției atomilor dintr-o fază disimetrică față de distribuția lor în fază simetrică; fazei simetrice îi corespunde $\eta = 0$, iar în fază disimetrică η are valori diferite de zero, pozitive sau negative. Vom numi această mărime *parametru de disimetrie*. Deoarece structura unui cristal la o tranziție de speța a doua variază continuu, parametrul de disimetrie are, în apropierea punctului de tranziție valori cât de mici vrem. În cazul tranzițiilor legate de deplasarea atomilor, η poate fi interpretat drept mărime a deplasării. Astfel, în cazul tranziției din titanatul de bariu, este natural ca parametrul de disimetrie să fie luat egal cu raportul dintre deplasarea unui atom de titan, u_{Ti} din centrul prismei tetragonale regulate, formată de atomii de bariu cei mai apropiați, și muchia a a celulei elementare a modifi cației cubice: $\eta = u_{Ti}/a$.

În cazul tranzițiilor legate de ordonare, parametrul de disimetrie poate fi considerat egal cu gradul de ordonare, adică cu mărimea care arată de câte ori este mai mare probabilitatea ca un atom de o anumită specie să se afle în subrețeaua dată, decât probabilitatea pentru un atom de cealaltă specie. Dacă de pildă în cazul tranziției de speța a doua, examinată mai sus, în cazul alamei, probabilitățile respective le notăm cu w_{Cu} și w_{Zn} . atunci

$$\eta = (w_{Cu} - w_{Zn})/(w_{Cu} + w_{Zn}).$$

În acest paragraf ne vom limita la studiul tranzițiilor de fază de speța a doua, care se produc cu reducerea simetriei la jumătate. În acest caz se formează totdeauna două tipuri de domenii: unuia dintre ele îi corespund valori pozitive ale parametrului de disimetrie, iar celuilalt valori negative. Evident, parametrul de disimetrie este invariant față de toate acele operații de simetrie

care transformă fiecare tip de domeniu în sine însuși, adică față de grupul spațial al fazei disimetrice. Acele operații ale grupului spațial al fazei simetrice, care nu sînt cuprinse în grupul spațial al fazei disimetrice, transformă, după cum s-a remarcat, domeniile de un tip în domenii de celălalt tip; deoarece în domenii de tipuri diferite parametrul de disimetrie are semne contrare, ca urmare a acestor operații el se înmulțește cu -1 .

Evident, toate funcțiile pare posibile ale parametrului de disimetrie, în particular, gradele lui pare, vor fi invariante ai grupului spațial al fazei simetrice. Produsele dintre funcțiile pare ale parametrului de disimetrie și expresiile invariante față de grupul spațial al fazei simetrice, expresii formate din componentele forțelor termodinamice, sînt, de asemenea, invariante față de acest grup. Reamintim că tocmai din invarianța forțelor și coordonatelor termodinamice față de translațiile formate din componentele lor, rezultă că expresiile sînt invariante față de grupul spațial al cristalului, atunci și numai atunci cînd ele sînt invariante față de grupul punctual al acestuia (v. §§ 25 și 44).

Există însă și un alt tip de invariante: produsele dintre parametrul de disimetrie (sau funcții ale lui impare, în particular, gradele impare) și acele expresii formate din componente ale forțelor sau coordonatelor termodinamice, care se transformă la fel ca parametrul de disimetrie. Fie $K_a X_a$ și $L_{ab} X_a X_b$ tocmai astfel de funcții în raport cu forțele generalizate*: ele sînt invariante la operațiile care se conservă în cadrul tranziției în faza disimetrică, iar prin aplicarea operațiilor care se pierd prin această tranziție se înmulțesc cu -1 . Coeficienții K_a și L_{ab} trebuie comparați cu elementele matricei M a potențialului termodinamic (v. §§ 57, 58, 60): coeficienții L_{ab} corespund elementelor M_{ab} cu aceiași indici, iar K_a elementelor M_{0a} și M_{a0} . Vom considera că sînt supuse la transformare nu forțele termodinamice X_a , ci coeficienții K_a și L_{ab} ; atunci problema se reduce la găsirea elementelor matricei M , invariante față de grupul punctual al fazei disimetrice, G_D , iar prin aplicarea celorlalte operații ale grupului punctual al fazei simetrice G , își schimbă semnul în semnul opus. Folosind faptul că în acest caz simetria se reduce la jumătate, nu este greu de arătat că din componentele tensorilor, invariante față de grupul G_D (dealtfel, ca și din coeficienții K_a și L_{ab}) se pot compune asemenea combinații liniare care, fie că sînt invariante față de toate operațiile grupului G , fie că sînt invariante numai față

* Aici, ca și în paragrafele precedente, X sînt forțele termodinamice generalizate, însă spre deosebire de indicii A, B, C, D , care pot lua zece valori: $A, B, C, D = 0, 1, \dots, 9$, indicii introduși, a, b, c, d , iau numai nouă valori: $a, b, c, d = 1, \dots, 9$.

de G_D , iar prin aplicarea operațiilor din $G - G_D$, își schimbă semnul în semnul opus (prin simbolurile $G - G_D$ s-a notat mulțimea elementelor grupului G , care nu fac parte din subgrupul lui, G_D ; subliniem că $G - G_D$ nu este un grup). În acest caz, numărul total de combinații liniare independente ale ambelor tipuri este egal cu numărul de componente independente care corespund tensorului invariant față de grupul G_D . Prin urmare, dacă se compară forma generală a tensorilor invariante față de grupul G și față de subgrupul său, G_D , atunci se constată că acele componente (sau combinații liniare ale lor), care sînt invariante față de G_D și se înmulțesc totodată cu -1 , prin aplicarea operațiilor $G - G_D$, completează forma generală a tensorului invariant față de G_D . Evident, și coeficienții K_a și L_{ab} completează forma generală a matricei M , invariantă față de G , pînă la forma generală a matricei, invariantă față de G_D (v. tab. 58.5). Formulele simbolice

$$K_a(G/G_D) = M_{0a}(G_D) - M_{0a}(G),$$

$$L_{ab}(G/G_D) = L_{ab}(G_D) - L_{ab}(G)$$

descriu metoda grafică de determinare a coeficienților K_a și L_{ab} pentru tranziția de fază de speța a doua dintre grupurile G și G_D , care se bazează pe acest rezultat; din schema matricei M a fazei disimetrice „se scade” schema matricei fazei simetrice: „diferența” este tocmai schema coeficienților K și L (fig. 65.1).

Trebuie însă să ținem cont de faptul că schema matricei fazei disimetrice poate fi diferită de o schemă standard. Este vorba de faptul că sistemul de coordonate în care este descrisă faza disimetrică este predeterminat prin alegerea sistemului de coordonate pentru faza simetrică. Astfel, dacă faza simetrică este descrisă într-un sistem de coordonate cristalofizic, așa cum se obișnuiește, nu este exclus ca sistemul de coordonate pentru faza disimetrică să nu mai fie un sistem cristalofizic. Exact așa se și

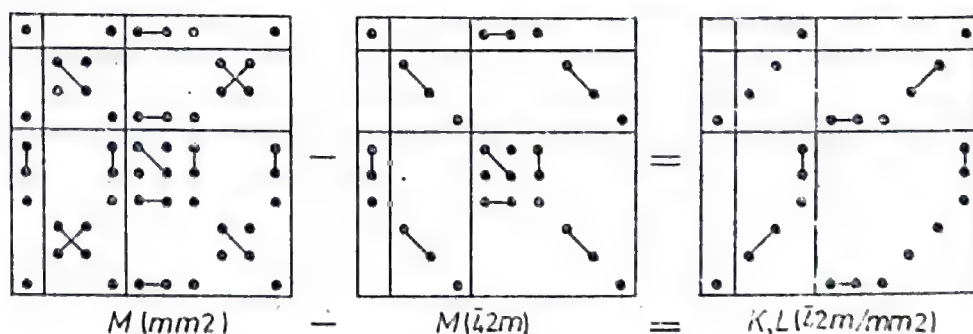


Fig. 65.1. Determinarea grafică a coeficienților K_a și L_{ab} pentru transformarea de fază de speța a doua într-un cristal de dihidrofosfat de potasiu, $G = 42m$, $G_D = mm2$.

constată în cadrul tranzițiilor din sarea Seignette și din dihidrofosfatul de potasiu. În primul caz, deosebirea față de un sistem de coordonate cristalofizic se reduce la schimbarea denumirii axelor ($G_p = 2 \parallel X_1$) și, respectiv, la permutarea unor coloane și linii în matricea $M(G_p)$, care, datorită acestui fapt, poate fi obținută fără nici o dificultate din matricea standard. În al doilea caz sistemul este rotit cu 45° față de sistemul cristalofizic ($G_p = mm2, 2 \parallel X_3, m \perp (e_1 \pm e_2)/\sqrt{2}$) ceea ce face ca schema matricei $M(G_p)$ să se deosebească substanțial față de cea standard; ea este dată în figura 65.1, iar relațiile care o leagă de cea standard (tab. 58.5) sînt cuprinse în § 85.

Vom considera potențialul termodinamic al cristalului pentru un parametru al disimetriei, η , funcție de forțele termodinamice $\Theta = T - T_c$, E_i , σ_λ și de acest parametru

$$\Phi = \Phi(\Theta, E, \sigma; \eta).$$

Aici sînt însă numai 10 variabile independente, nu 11: în cazul unor forțe termodinamice date, parametrul de disimetrie corespunzător acestor forțe se determină din condiția de echilibru termodinamic, adică din condiția ca potențialul termodinamic să fie minim.

Am putea crede că potențialul termodinamic pentru $\eta = 0$ este invariant față de grupul punctual al modifiției simetrice și că pentru $\eta \neq 0$ este invariant față de grupul punctual al modifiției disimetrice. Dar nu este așa. În realitate, potențialul termodinamic trebuie să rămână invariant față de un grup punctual superior și pentru $\eta \neq 0$, deoarece el exprimă nu numai un singur mod de micșorare a simetriei, ci pe toate aceste moduri și, corespunzător, toate tipurile de domenii.

În cazul particular în care simetria se reduce de două ori, dealtfel singurul, cum este studiat aici, se formează două tipuri de domenii. Unuia dintre acestea îi corespund valorile pozitive ale lui η , iar celuilalt valorile negative, ambele trebuind să fie descrise în aceeași măsură prin potențialul termodinamic. Este deci clar că în absența unui cîmp electric și a tensiunilor mecanice, dezvoltarea potențialului termodinamic în raport cu gradele parametrului de disimetrie, dacă în general aceasta este posibilă, conține numai gradele pare ale acestui parametru

$$\Phi = \Phi_0 + A\eta^2 + B\eta^4 + \dots; \quad (65.1)$$

coeficienții acestei dezvoltări, Φ_0 , A și B sînt funcții de temperatură (raționamentul de mai sus este valabil numai în cazul parti-

cular considerat; pentru cazul general, v. Landau și Lifșit, 1964, cap. XIV).

Punctul tranziției de speța a doua este probabil un punct particular al potențialului termodinamic; din această cauză, faptul că dezvoltarea (65.1) este permisă nu este demonstrat. Într-o serie de cazuri însă concluziile stabilite pe baza acestei dezvoltări concordă satisfăcător cu datele experimentale.

Condițiile de echilibru cer ca potențialul termodinamic să fie minim

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 2A\eta + 4B\eta^3 = 0, \quad (65.2)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta^2} = 2A + 12B\eta^2 > 0. \quad (65.3)$$

Condiția (65.2) este satisfăcută de trei valori ale parametrului de disimetrie: $\eta = 0$ și

$$\eta = \pm \sqrt{-A/(2B)}. \quad (65.4)$$

Soluția $\eta = 0$ corespunde modificăției simetrice. Din condiția (65.3) rezultă că pentru această modificare $A > 0$.

Soluția (65.4), din contră, corespunde modificăției disimetrice a ambelor tipuri de domenii ale ei. Din forma ei este clar că în această modificare coeficienții A și B sînt de semne diferite, iar din condiția (65.3) rezultă că în această modificare $A < 0$; prin urmare, $B > 0$.

Așadar, în punctul de tranziție, coeficientul A își modifică semnul. În prima aproximație,

$$A = a(T - T_c), \quad (65.5)$$

în care T_c este punctul tranziției de fază de speța a doua, care se mai numește și punct Curie. Dacă unei temperaturi mai mari îi corespunde o modificare simetrică, coeficientul a va fi pozitiv, iar în caz contrar — negativ.

În punctul Curie, $\partial^2 \Phi / \partial \eta^2 = 0$. Pentru ca și în acest punct potențialul termodinamic să aibă un minim, trebuie să fie îndeplinite condițiile

$$\frac{\partial^3 \Phi}{\partial \eta^3} = 0, \quad \frac{\partial^4 \Phi}{\partial \eta^4} = 0.$$

De unde rezultă că și în punctul Curie $B > 0$. Datorită continuității, acest coeficient este pozitiv într-un anumit interval de temperatură din jurul punctului de tranziție precum și în modificarea simetrică. Într-o primă aproximație îl vom considera pur și simplu o constantă pozitivă.

Prin urmare, în modificarea disimetrică avem

$$\eta = \pm \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{2B}}, \quad (65.6)$$

în care a și B nu depind, în primă aproximație, de temperatură. Această formulă exprimă dependența de temperatură a parametrului de disimetrie,

$$\eta \sim |T - T_c|^{1/2},$$

caracteristică pentru tranzițiile de speță a doua.

Prin urmare, dezvoltarea (65.1) a căpătat forma

$$\Phi = \Phi_0(T) + a\Theta\eta^2 + B\eta^4 + \dots, \quad (65.7)$$

în care $\Theta = T - T_c$. Dacă cristalul este plasat în câmp electric sau este supus acțiunii tensiunilor mecanice, această dezvoltare trebuie completată cu termenii care să depindă de componentele vectorului intensitate a câmpului electric, $E_i = X_i$ și ale tensorului tensiunilor, $\sigma_\lambda = X_{3+\lambda}$ și care să fie invarianți față de grupul punctual al modificății simetrice. Asemenea termeni pot fi subîmpărțiți în trei tipuri.

1. Invarianți, formați din componentele Θ și X_b ale forțelor termodinamice generalizate. În ansamblu ei formează sume de forma $R_b^{(0)}\Theta X_b$ și $M_{bd}^{(0)}X_b X_d$. Aici, $R_b^{(0)}$ și $M_{bd}^{(0)}$ au aceeași formă și satisfac aceleași relații ca și elementele matricei termodinamice $M_{BD}(B, D=0, 1, \dots, 9)$ a clasei cristalografice considerate (v. tab. 58.5), în timp ce $R_b^{(0)}$ corespund elementelor M_{0B} și M_{b0} , iar $M_{bd}^{(0)}$ elementelor M_{bd} .

2. Produse ale invarianților forțelor termodinamice generalizate cu invarianții parametrului de disimetrie. Dintre ele vom analiza numai pe acelea care intră în suma $Q_b X_b \eta^2$. Evident, coeficienții Q_b au aceeași formă și satisfac aceleași relații ca și $R_b^{(0)}$.

3. Invarianți, compuși din produse dintre parametrul de disimetrie și forțele termodinamice generalizate, împreună cu combinațiile lor pătratice. În ansamblu, ele reprezintă sume de forma $K_b X_b \eta$ și $L_{bd} X_b X_d \eta$, examinate amănunțit mai sus. La același tip de invarianți se referă și sumele de forma $H_b \Theta X_b \eta$, însă

pe ele nu le vom studia, deoarece la temperaturile apropiate de punctul Curie, ele reprezintă doar mici adaosuri la sumele $K_b X_b \eta$.

Așadar, ajungem la următoarea dezvoltare a potențialului termodinamic al unui cristal tensionat și supus unui câmp electric, în vecinătatea punctului Curie

$$\begin{aligned} \Phi = \Phi_0(T) - R_b^{(0)} \Theta X_b - \frac{1}{2} M_{ba}^{(0)} X_b X_a + a \Theta \eta^2 + \\ + B \eta^4 - K_b X_b \eta - \frac{1}{2} L_{ba} X_b X_a \eta - Q_b X_b \eta^2. \end{aligned} \quad (65.8)$$

Parametrul de disimetrie, η , se determină din condiția de echilibru termodinamic

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 2a\Theta\eta + 4B\eta^3 - K_b X_b - \frac{1}{2} L_{ba} X_b X_a - 2Q_b X_b \eta = 0. \quad (65.9)$$

Valoarea acestui parametru, în absența câmpului electric și a tensiunilor mecanice, este

$$\eta_0 = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \pm \sqrt{-\frac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.10)$$

Diferențiind egalitatea (65.9) în raport cu T și cu X_b , obținem

$$\frac{\partial \eta}{\partial T} = - \frac{2a\eta}{2a\Theta + 12B\eta^2 - 2Q_b X_b}, \quad (65.11)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial X_b} = \frac{K_b + L_{ba} X_a + 2Q_b \eta}{2a\Theta + 12B\eta^2 - 2Q_b X_b},$$

Făcînd în aceste formule înlocuirea $\eta = \eta_0$ și punînd $X_b = 0$, găsim valorile derivatelor corespunzătoare pentru câmpuri elec-

trice și tensiuni mecanice foarte mici

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial T}\right)_0 = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \frac{\eta_0}{2\Theta} & \text{în faza disimetrică;} \end{cases} \quad (65.12)$$

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial X_b}\right) = \begin{cases} \frac{K_b}{2a\Theta} & \text{în faza simetrică,} \\ -\frac{K_b + 2Q_b\eta_0}{4a\Theta} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases}$$

Să calculăm coordonatele termodinamice generalizate ale unui cristal. Entropia unității de volum este

$$S = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T} \right)_{\text{tot}} = - \frac{\partial \Phi}{\partial T} - \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial T}.$$

În virtutea condiției de echilibru, (65.3), al doilea termen este egal cu zero, astfel încît

$$S = - \frac{d\Phi_0}{dT} + R_b^{(0)} X_b - a\eta^2. \quad (65.13)$$

Analog găsim celelalte coordonate termodinamice

$$x_b = R_b^{(0)}\Theta + M_{bd}^{(0)}X_d + K_b\eta + L_{bd}X_d\eta + Q_b\eta^2. \quad (65.14)$$

Acum se poate analiza variația proprietăților cristalului, adică variația coeficienților lui termodinamici. Căldura specifică este

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\text{tot}} = T \frac{\partial S}{\partial T} + T \frac{\partial S}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial T}. \quad (65.15)$$

Substituind expresia (65.13) în formula (65.15), punînd $X_b = 0$ și utilizînd relațiile (65.12) și (65.10), obținem căldura specifică C_p pentru tensiuni mecanice și cîmpuri electrice constante și

egale cu zero

$$C_p = \begin{cases} -T \frac{d^2\Phi_0}{dT^2} & \text{în faza simetrică,} \\ -T \frac{d^2\Phi_0}{dT^2} + \frac{a^2 T}{2B} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.16)$$

Prin urmare, în cadrul trecerii de la modificăția simetrică la modificăția disimetrică, căldura specifică se mărește în salturi, un salt fiind egal cu

$$\Delta C_p = \frac{a^2 T_c}{2B}. \quad (65.17)$$

Această concluzie se bazează pe presupunerea că potențialul termodinamic nu prezintă singularități în punctul Curie. În multe tranziții de speța a doua, această concluzie nu concordă, într-o măsură mai mare sau mai mică, cu datele experimentale; gradul acestei neconcordanțe arată cât de importantă este discontinuitatea suferită de potențialul termodinamic în punctul Curie.

Coeficienții piroelectrici $p_i = R_i$ și coeficienții de dilatare termică, $\alpha_\lambda = R_{3+\lambda}$ se calculează cu oricare dintre următoarele formule

$$R_b = \frac{\partial S}{\partial X_b} + \frac{\partial S}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X_b}, \quad (65.18)$$

$$R_b = \frac{\partial x_b}{\partial T} + \frac{\partial x_b}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial T}.$$

Valorile acestor coeficienți în cazul unor câmpuri electrice și al unor tensiuni mecanice foarte slabe se calculează prin același procedeu ca și la deducerea formulei (65.16); ele sînt egale cu

$$R_b = \begin{cases} R_b^{(0)} & \text{în faza simetrică,} \\ R_b^{(0)} \pm \frac{K_b}{2} \sqrt{-\frac{a}{2B\Theta}} - \frac{aQ_b}{2B} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.19)$$

Din proprietățile coeficienților K_b și Q_b rezultă că coeficienții piroelectrici și cei de dilatare termică, care sînt diferiți de zero în faza simetrică, la tranziția în faza disimetrică, suferă un salt egal cu

$$\Delta R_b = - \frac{a Q_b}{2B}. \quad (65.20)$$

În ambele tipuri de domenii acești coeficienți sînt aceiași.

Dimpotrivă, acei coeficienți piroelectrici și coeficienți ai dilatării termice (sau combinații ale lor) care sînt diferiți de zero numai în faza disimetrică, au în domenii diferite semne contrare; pe măsura apropierii de punctul Curie (din partea fazei disimetrice) acești coeficienți cresc după legea $|T - T_c|^{-1/2}$

$$R_b = \pm \frac{K_b}{2} \sqrt{-\frac{a}{2B\Theta}}. \quad (65.21)$$

Să examinăm, în sfîrșit, coeficienții permitivității dielectrice,

$$\kappa_{ik} = 4\pi M_{ik} \quad (i, k = 1, 2, 3),$$

coeficienții deformabilității elastice,

$$s_{\lambda\mu} = M_{3+\lambda, 3+\mu} \quad (\lambda, \mu = 1, \dots, 6)$$

și coeficienții piezoelectricei

$$d_{k\lambda} = M_{k, 3+\lambda}.$$

Toți acești coeficienți pot fi calculați cu oricare dintre următoarele formule

$$M_{ba} = \frac{\partial x_b}{\partial X_a} + \frac{\partial x_b}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X_a},$$

$$M_{ba} = \frac{\partial x_a}{\partial X_b} + \frac{\partial x_a}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X_b}. \quad (65.22)$$

În cazul unor câmpuri electrice și al unor tensiuni mecanice foarte slabe, ei sînt egali cu

$$M_{ba} = \begin{cases} M_{ba}^{(0)} + \frac{K_b K_a}{2a\Theta} & \text{în faza simetrică,} \\ M_{ba}^{(0)} + \frac{Q_b Q_a}{2B} - \frac{K_b K_a}{4a\Theta} \mp \frac{K_b Q_a + K_a Q_b}{2} \sqrt{-\frac{1}{2aB\Theta}} \pm \\ \pm L_{ba} \sqrt{-\frac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.23)$$

Pentru analiza acestei expresii remarcăm mai întîi că termenii cu radicali intră numai în acei coeficienți M_{ba} (sau în combinații de ale lor) care sînt diferiți de zero numai în faza disimetrică, iar termenii fără radicali sînt diferiți de zero numai în faza simetrică. Totodată, termenii care conțin produsele $K_b K_a$ și $Q_b Q_a$ fac parte din coeficienți diferiți.

Prin urmare, coeficienții M_{ba} diferiți de zero atît în faza simetrică cît și în faza disimetrică sînt aceiași în ambele tipuri de domenii. În cazul unor asemenea coeficienți sînt posibile trei tipuri de comportări.

1. Coeficientul în general nu variază în cadrul tranziție

$$M_{ba} = M_{ba}^{(0)} \text{ în ambele faze.} \quad (65.24)$$

2. Coeficientul suferă un salt de tranziție, egal cu

$$\Delta M_{ba} = \frac{Q_b Q_a}{2B}; \quad (65.25)$$

în acest caz saltul coeficienților diagonali (cum sînt κ_{11} , s_{11} și s_{44}) este pozitiv, adică în faza disimetrică coeficientul permitivității dielectrice sau al deformabilității elastice este mai mare decît în faza simetrică.

3. La apropierea de punctul Curie, atît dinspre regiunea fazei de disimetrie cît și dinspre regiunea fazei de simetrie, coeficientul crește după legea $|\Theta|^{-1}$. În acest caz, în apropierea punctului

Curie termenii $M_{ba}^{(0)}$ pot fi neglijați, astfel încît

$$M_{ba} = \begin{cases} \frac{K_b K_a}{2a \Theta} & \text{în faza simetrică,} \\ -\frac{K_b K_a}{4a \Theta} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.26)$$

La trecerea prin punctul Curie semnul coeficientului M_{ba} nu se schimbă; în particular, coeficienții diagonali rămîn pozitivi. Pe lîngă aceasta, este adevărată „legea dublării”: pentru distanțe egale de punctul Curie, coeficientul M_{ba} în faza simetrică este de două ori mai mare decît cel din faza disimetrică.

Acei coeficienți M_{ba} , sau combinații ale lor, care sînt diferite de zero numai în faza disimetrică, sînt egali în valoare absolută, în domenii de tipuri diferite fiind însă de semne contrare. În cazul unor astfel de coeficienți sînt posibile două tipuri de comportări.

1. Pe măsura îndepărtării de punctul Curie coeficientul M_{ba} crește în valoare absolută ca $|\Theta|^{1/2}$; acest tip de comportare apare cînd

$$K_b Q_a + K_a Q_b = 0,$$

însă $L_{ba} \neq 0$. În acest caz,

$$M_{ba} = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \pm L_{ba} \sqrt{\frac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.27)$$

2. Pe măsura apropierii de punctul Curie dinspre partea fazei disimetrice, coeficientul M_{ba} crește ca $|\Theta|^{-1/2}$

$$M_{ba} = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \mp \frac{K_b Q_a + K_a Q_b}{2} \sqrt{-\frac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.28)$$

Pentru aceasta este necesar ca

$$K_b Q_a + K_a Q_b \neq 0.$$

În acest caz nu are importanță dacă coeficientul L_{ba} este sau nu diferit de zero.

Să examinăm acum variația coordonatei termodinamice, x_b , în cadrul unei tranziții de fază de speța a doua. În absența cîmpului electric și a tensiunilor mecanice, din formula (65.14) obținem

$$x_b = \begin{cases} R_b^{(0)} \Theta & \text{în faza simetrică,} \\ \left(R_b^{(0)} - \frac{a Q_b}{2B} \right) \Theta \pm K_b \sqrt{-\frac{a \Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.29)$$

Relația (65.29) presupune că dilatarea termică și polarizarea piroelectrică se iau plecînd de la temperatura Curie. Termenii proporționali cu Θ se referă la acele componente ale deformației termice și polarizării piroelectrice care sînt diferite de zero în ambele faze, determinînd salturile coeficienților termodinamici, R_b , corespunzători.

Un caracter cu totul diferit îl au coordonatele termodinamice spontane, diferite de zero, numai în faza disimetrică: componentele polarizării spontane și al deformației spontane sînt

$$x_b^{(sp)} = \pm K_b \sqrt{-\frac{a \Theta}{2B}}. \quad (65.30)$$

Ele vor fi egale cu zero în faza simetrică, pe cînd în faza disimetrică crește repede (ca $|\Theta|^{1/2}$) cu îndepărtarea de la punctul Curie. Coordonata termodinamică spontană este proporțională cu parametrul de disimetrie (v. formulele (65.6) și (65.30)) și, de aceea, în cadrul studiului tranzițiilor în care apare o coordonată spontană, ea poate fi utilizată drept parametru de disimetrie. Astfel, în cazul studiului tranzițiilor seignettoelectrice, ca parametru de disimetrie se folosește, adesea, polarizarea spontană. Există însă numeroase tranziții de fază de speța a doua, care nu sînt însoțite de apariția coordonatelor spontane; așa sînt, de exemplu, tranzițiile din cuarț, din salpetru de sodiu, din alamă, din trioxid de wolfram, din aliaj heussler.

O clasă importantă de tranziții de fază de speța a doua o constituie *tranzițiile seignettoelectrice* — tranziții în care apare

polarizarea spontană*. Pentru aceasta este necesar ca în clasa cristalografică a fazei seignettoelectrice numărul de componente independente ale vectorului de material să fie mai mare decât numărul lor în clasa fazei paraelectrice (în cazul tranzițiilor seignettoelectrice faza simetrică este numită, de obicei, fază *paraelectrică*, iar cea disimetrică, *seignettoelectrică*). Din această cauză, faza seignettoelectrică se referă totdeauna la una dintre clasele piroelectrice; faza paraelectrică aparține, de obicei, uneia dintre clasele nepiroelectrice, cu toate că în principiu prin intermediul modificărilor seignettoelectrice pot fi legate, de exemplu, modificările ale claselor $mm2$ și m , 2 și 1 , m și 1 .

În cazul particular al reducerii la jumătate a simetriei, singurul caz pe care îl și studiem aici, tranziția seignettoelectrică este caracterizată prin faptul că va fi diferit de zero cel puțin unul dintre coeficienții K_i ($i = 1, 2, 3$). În acest caz, așa cum s-a arătat mai sus (v. relația (65.26), pe măsură ce ne apropiem de punctul Curie, cel puțin una dintre componentele tensorului permitivității dielectrice crește ca $|\Theta|^{-1}$, astfel încât în faza paraelectrică ea crește de două ori mai repede decât în cea seignettoelectrică

$$\kappa_{ij} = \begin{cases} \frac{2\pi K_i K_j}{a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\ -\frac{\pi K_i K_j}{a\Theta} & \text{în faza seignettoelectrică} \end{cases} \quad (65.31)$$

$(i, j = 1, 2, 3)$

Pentru tranzițiile seignettoelectrice mai este caracteristică, de asemenea, apariția în faza seignettoelectrică a unor coeficienți piezoelectrice, care cresc odată cu apropierea de punctul Curie ca $|\Theta|^{-1/2}$. Asemenea coeficienți piezoelectrice sînt

$$d_{i\lambda} = \begin{cases} 0 & \text{în faza paraelectrică,} \\ \mp \frac{K_i Q_{3+\lambda}}{2} \sqrt{-\frac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza seignettoelectrică} \end{cases}$$

$(i = 1, 2, 3; \lambda = 1, \dots, 6).$
(65.32)

* Privind seignettoelectricitatea se pot consulta următoarele lucrări: Känzig (1960); Jona și Shirane (1965); Jeludev (1968 și 1973); Smolenski și Krainik (1968); Burfoot (1970); Sonin și Strukov (1970); Smolenski, Bokov, Isupov, Krainik, Pasinkov și Șur (1971); Vaks (1973). În special asupra simetriei modificărilor cristaline, legate de tranzițiile seignettoelectrice, de văzut: Jeludev și Șuvalov (1956); Sonin și Jeludev (1959); Indenbom (1960, a); Șuvalov (1963 și 1970); Lavniuk și Sannikov (1971).

Dintre aceștia, trei sînt în orice caz diferiți de zero, deoarece coeficienții Q_4 , Q_5 și Q_6 nu devin zero în nici o clasă cristalografică.

Acestea sînt proprietățile comune tuturor seignettoelectricilor. Tabelul 65.1 arată cum se manifestă ele în cazul a șase cristale seignettoelectrice.

În cazul unora dintre tranzițiile seignettoelectrice, pe lângă polarizarea spontană apare și o deformare spontană; asemenea tranziții există în dihidrofosfatul de potasiu și în sarea Seignette. În acest caz, în afară de unul dintre coeficienții K_i ($i = 1, 2, 3$) mai este diferit de zero și unul dintre coeficienții $K_{3+\lambda}$ ($\lambda=1, \dots, 6$). În domenii de tipuri diferite, atît polarizarea spontană cît și deformarea spontană au semne opuse; prin urmare, semnul deformării spontane este dat de semnul polarizării spontane, așa cum se vede din figura 65.2. În cazul acestor tranziții, odată cu apropierea de punctul Curie nu numai coeficientul permitivității dielectrice crește ca $|\Theta|^{-1}$, ci și unul dintre coeficienții deformabilității elastice

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} \frac{K_{3+\lambda}K_{3+\mu}}{2a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\ -\frac{K_{3+\lambda}K_{3+\mu}}{4a\Theta} & \text{în faza seignettoelectrică} \end{cases} \quad (65.33)$$

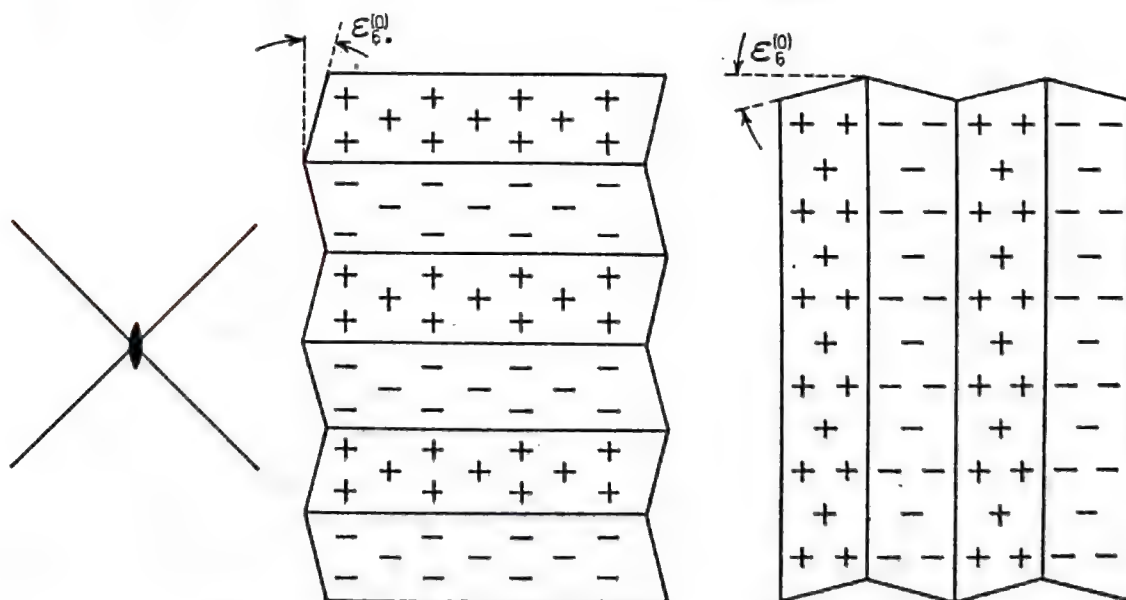




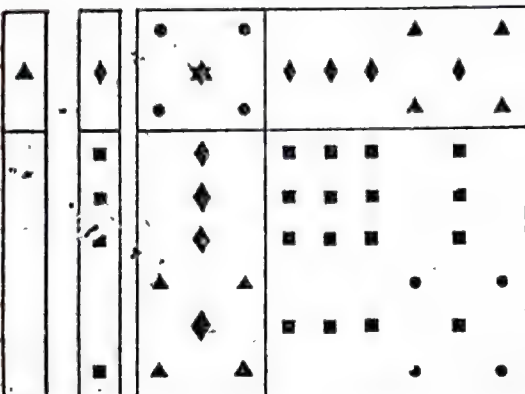
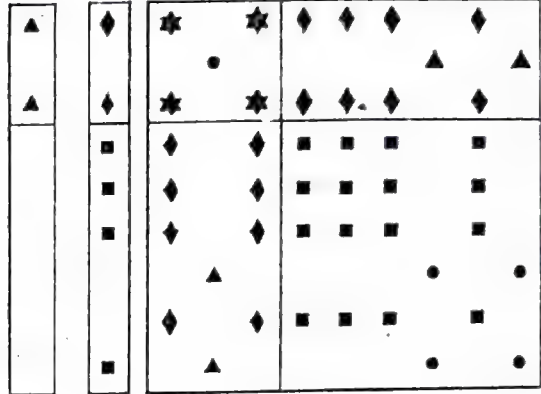
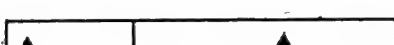



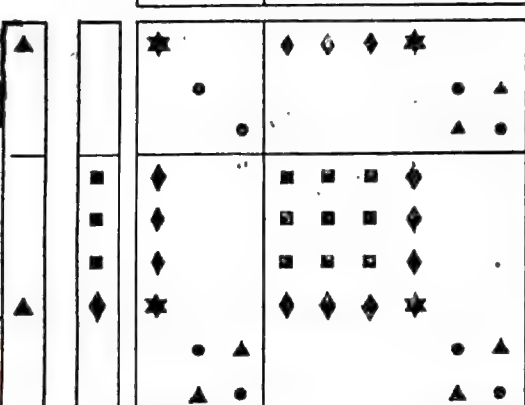
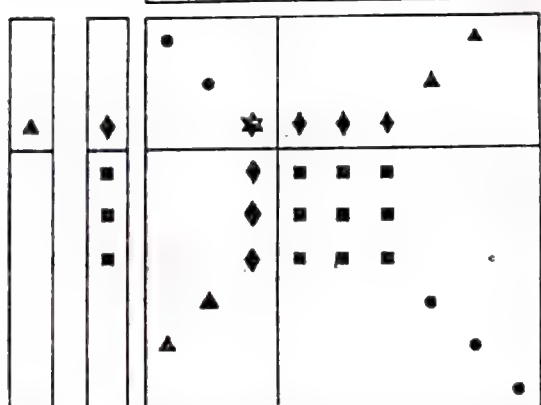


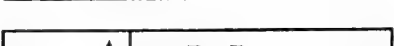

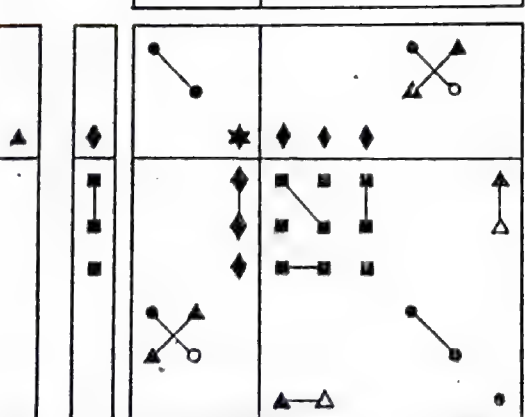
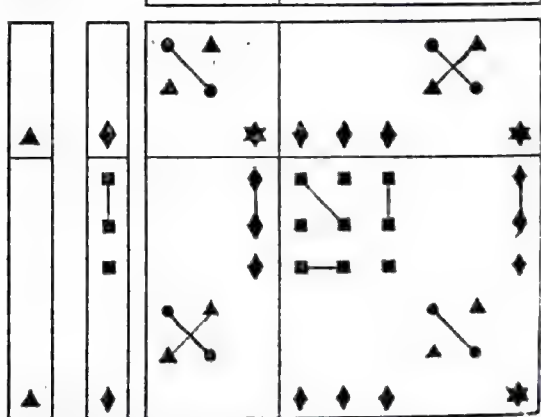


Fig. 65.2. Polarizarea spontană și deformarea spontană a domeniilor modificaliiei seignettoelectrice ($mm2$) a dihidrofosfatului de potasiu. În stînga este dată orientarea elementelor de simetrie. Deformarea spontană, $\epsilon_6^{(0)}$, este reprezentată exagerat.

Tabelul 65.1

Variațiile proprietăților fizice ale cristalelor în cazul unor tranziții de fază de speța a doua

$2/m$ 	$2/m$ 
2 	m 
	
222 	mmm 
$2 X$ 	$mm2$ 
	
422 	$\bar{4}2m$ 
4 	$mm2$ 
	

Tabelul 65.1 (continuare)

Notății

		1	2
		3	4
		5	6
			7

Notă. În clasa 422, în 6, primele două rom-
buri sînt unite cu o linie; în clasa 622, în
7, în dreapta jos este un X.

Mărimea	În faza simetrică	În faza disimetrică
▲	egală cu zero	$\sim \sqrt{ \theta }$
◆	egală cu zero	$\sim \frac{1}{\sqrt{ \theta }}$
★	$\sim \frac{2}{ \theta }$	$\sim \frac{1}{ \theta }$
■	în timpul tranziției suferă un salt	
●	nu este egală cu zero, nu suferă salt	

1 — polarizare spontană; 2 — deformare spontană; 3 — coeficienți piroelectrici; 4 — coeficienți ai dilatării termice; 5 — coeficienți ai permitivității dielectrice; 6 — coeficienți piezoelectrici; 7 — coeficienți ai deformabilității elastice. Celelalte notații sînt ca și în tabelul 58.5. Toate schemele sînt simetrice în raport cu diagonala principală.

și unul dintre coeficienții piezoelectricei

$$d_{12} = \begin{cases} \frac{K_t K_{3+\lambda}}{2a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\ -\frac{K_t K_{3+\lambda}}{4a\Theta} & \text{în faza seignetteoelectrică.} \end{cases} \quad (65.34)$$

În afară de aceasta, unii coeficienți ai deformabilității elastice, diferiți de zero numai în faza seignettoelectrică, cresc în apropiere de punctul Curie ca

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} 0 & \text{în faza paraelectrică,} \\ \mp \frac{K_{3+\lambda}Q_{3+\mu} + K_{3+\lambda}Q_{3+\mu}}{2} \sqrt{-\frac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza seignettoelectrică.} \end{cases}$$

(65.35)

Aceste particularități ale tranzițiilor seignettoelectrice în sarea Seignette și în dihidrofosfat de potasiu sînt date, de asemenea, în tabelul 65.1.

Dacă se studiază și tranzițiile seignettoelectrice însoțite de modificări ale simetriei mai mult decît de două ori (ca, de exemplu, tranziția seignettoelectrică în titanatul de bariu), gama deosebiriilor crește și mai mult. Însă pe fondul deosebirilor apar și mai pregnant în evidență proprietățile comune ale tuturor tranzițiilor seignettoelectrice: apariția polarizării spontane; creșterea ca $|T - T_c|^{-1}$ a unuia dintre coeficienții permitivității dielectrice în cazul apropierii de punctul Curie, atît în regiunea seignettoelectrică, cît și în regiunea paraelectrică, fiind valabilă, totodată, legea dublării; existența proprietăților piezoelectrice în cadrul modifiației seignettoelectrice, cu toate că unii coeficienți piezoelectrice ating, în apropierea punctului Curie, valori foarte mari.

Valorile foarte mari ale coeficienților permitivității dielectrice și ale coeficienților piezoelectrice fac posibile diferite aplicații tehnice ale materialelor seignettoelectrice.

În cazul multor tranziții de fază despeța a doua, proprietățile fizice ale cristalelor fac să apară anomalii, care sînt mai puțin importante decît în cazul substanțelor seignettoelectrice. Astfel, pentru tranziția $\alpha-\beta$ în cuarț, studiată de I. A. Iakovlev (1957), nici unul dintre coeficienții termodinamici nu atinge valori anormal de mari; în faza disimetrică (clasa 32) apar un nou coeficient al deformabilității elastice și un coeficient piezoelectric, care cresc odată cu scăderea temperaturii ca $|\Theta|^{1/2}$ (v. tab. 65.1). În cazul tranziției de fază din salpetru de sodiu (v. tab. 64.1), a căror teorie au propus-o Dzealoșinski și Lifșiț (1957), lungimea translației elementare după direcția axei principale de simetrie crește de două ori, pe cînd grupul punctual nu se modifică. În cadrul acestor tranziții de fază, este posibil numai un singur tip de variații ale

coeficienților termodinamici — salturile unora dintre ei. Acest fapt este confirmat de tabelul 65.1. O evaluare nu prea complicată arată că salturile coeficienților de dilatare termică și de deformabilitate elastică sînt legate, în acest caz, prin relația

$$\frac{\Delta \alpha_1}{\Delta \alpha_3} = \frac{\Delta s_{11}}{\Delta s_{13}} = \frac{\Delta s_{12}}{\Delta s_{13}} = \frac{\Delta s_{13}}{\Delta s_{33}} = \frac{Q_1}{Q_3}. \quad (65.36)$$

Dilatarea termică în cazul salpetrului de sodiu este puternic anizotropă: $\alpha_1 \approx 0,1 \alpha_3$. Dzealoșinski și Lifșiț au presupus că și salturile acestor mărimi sînt legate aproximativ tot prin aceleași relații. În acest caz pot fi înțelese perfect rezultatele experimentale ale lui Kornfeld și Ciudinov (1957), care au determinat saltul coeficientului s_{33} , fără a găsi însă nici un salt pentru s_{11} și s_{12} .

§ 66. METODELE MATEMATICE ALE TEORIEI TRANZIȚIILOR DE FAZĂ

Așa cum s-a remarcat în § 64, cînd două modificații cristaline sînt legate între ele printr-o tranziție de fază de speța a doua, grupul spațial G_D al uneia dintre modificații este un subgrup al grupului spațial G al celeilalte modificații $G_D \subset G$. Aceasta este însă numai o condiție necesară, dar nici pe departe și suficientă; elucidarea celorlalte condiții pe care trebuie să le satisfacă grupurile de simetrie ale modificațiilor cristaline, legate de tranzițiile de speța a doua ocupă un loc important în lucrările fundamentale de teoria tranzițiilor de fază (Landau, 1937; Lifșiț, 1941; Landau și Lifșiț, 1964), necesitînd utilizarea unui aparat matematic relativ complicat și, în primul rînd, a teoriei reprezentărilor grupurilor (de aceea, vom presupune că cititorul acestui paragraf este familiarizat cu teoria reprezentărilor grupurilor spațiale — v. Landau și Lifșiț (1963, § 94, 95 și 1964, § 136); Liubarski (1957); Petrașen și Tihonov (1967); Streitwolf (1971); Bir și Pikus (1972)). Este mai comod să considerăm că grupul G al modificației simetrice este dat, iar grupurile G_D ale modificației disimetrice, care pot fi puse în legătură cu modificația simetrică a tranziției de fază de speța a doua, sînt cele care trebuie găsite.

Pentru aceasta vom defini în punctul tranziției de fază funcția de densitate microscopică $\rho(x_1, x_2, x_3)$ a cristalului; ea este invariantă față de grupul spațial G . Într-o modificație disimetrică funcția de densitate va fi egală cu $\rho + \delta\rho$, unde $\delta\rho$ este invariantă numai față de grupul G_D , dar nu și față de grupul G . Plecînd

de la această funcție, $\delta\rho$, putem construi funcțiile $\varphi_\alpha^{(m)}$ ($\alpha=1, \dots, n_m$) care să fie tot reale, liniar independente și astfel normate încît, pe de-o parte, fiecare dintre ele să se transforme după o anumită reprezentare fizic ireductibilă, Γ_m , avînd dimensiunea n_m a grupului spațial G , iar pe de altă parte, ca $\delta\rho$ să se reprezinte sub forma combinației liniare

$$\delta\rho = \sum_m \sum_\alpha c_\alpha^{(m)} \varphi_\alpha^{(m)}. \quad (66.1)$$

(Am numit aici fizic ireductibilă orice reprezentare ireductibilă reală, sau suma a două reprezentări ireductibile imaginare complex-conjugate.) În însuși punctul tranziției, toți coeficienții $c_\alpha^{(m)}$ sînt egali cu zero, iar în modificăția disimetrică cel puțin unul dintre coeficienții corespunzători reprezentării neunitare va fi diferit de zero, întrucît, în caz contrar, simetria nu s-ar modifica prin tranziție. Rezultă deci că printre reprezentările ireductibile, ale căror funcții fundamentale sînt conținute în dezvoltarea (66.1), există cel puțin una neunitară.

Coeficienții $c_\alpha^{(m)}$, corespunzători reprezentărilor neunitare, determină semnificația termenilor neinvarianți față de grupul G din expresia funcției de densitate a fazei disimetrice, (66.1), avînd deci și rolul de parametru multidimensional al disimetriei. Acești coeficienți depind de condițiile exterioare; pentru a preciza ideile, vom considera că aceste condiții exterioare sînt date prin forțele termodinamice generalizate, T și $X = (X_1, \dots, X_9)$. În teoria tranzițiilor de fază de speța a doua este convenabil să considerăm provizoriu potențialul termodinamic Φ al modificăției disimetrice ca funcție nu numai de forțele termodinamice, ci și de componentele parametrului de disimetrie, c , urmînd ca abia după aceasta să găsim componentele parametrului c ca funcție de temperatură,

$$c_\alpha^{(m)} = c_\alpha^{(m)}(T)$$

din condiția

$$\left(\frac{\partial \Phi(T, X; c)}{\partial c_\alpha^{(m)}} \right)_{X=0} = 0. \quad (66.2)$$

Ecuatiile (66.2) rezultă din condiția de minim pentru potențialul termodinamic cînd forțele termodinamice sînt date. Tot din aceeași condiție rezultă și matricea

$$\left\| \left(\frac{\partial^2 \Phi(T, X; c)}{\partial c_\alpha^{(m)} \partial c_\beta^{(l)}} \right)_{X=0} \right\|,$$

care este pozitiv definită.

Potențialul termodinamic al fazei disimetrice, așa cum s-a explicat în § 65, trebuie să fie invariant față de grupul spațial G al fazei simetrice, ceea ce face ca dependența lui de coeficienții $c_\alpha^{(m)}$ să se reducă la dependența față de invariantii formați din acești coeficienți. În vecinătatea imediată a punctului de tranziție, $c_\alpha^{(m)}$ sînt mici, astfel încît rolul principal revine invariantilor de ordin inferior. În general, numărul invariantilor de grad s , liniar independenți, care pot fi formați din componentele unei mărimi ce se transformă după o reprezentare B a grupului G va fi egal cu numărul de reprezentări unitare conținute în reprezentarea $[B^s]$, adică cu ordinul s al simetriei reprezentării B . Acest număr este

$$m_G(B, s) = \frac{1}{N(G)} \sum_{g \in G} [\chi_B^s](g), \quad (66.3)$$

$N(G)$ fiind ordinul grupului G , iar $[\chi_B^s]$ — ordinul s al simetriei caracterului reprezentării, B ; v. Liubarski, 1957. Însă din niște mărimi care se transformă după o reprezentare fizic ireductibilă, în general nu se pot forma invarianti liniari, iar fiecare dintre aceste reprezentări posedă numai un singur invariant pătratic; printr-o alegere convenabilă a bazei, $\varphi_1^{(m)}, \dots, \varphi_n^{(m)}$, acesta se poate reprezenta sub formă de sumă a pătratelor componentelor. Astfel, în ipoteza că există posibilitatea dezvoltării potențialului termodinamic în serie, după componentele parametrului de disimetrie, vom obține că primii termeni ai acestei dezvoltări sînt de forma

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_m A^{(m)} \sum_{\alpha=1}^{n_m} (c_\alpha^{(m)})^2 + \dots,$$

în care $A^{(m)} = A^{(m)}(T, X)$ sînt funcții de forțele termodinamice.

Într-o modificare simetrică potențialul termodinamic trebuie să fie minim atunci cînd toți $c_\alpha^{(m)}$ sînt egali cu zero, iar în cea disimetrică, cînd cel puțin cîțiva dintre aceștia sînt diferiți de zero. Deoarece suma pătratelor este totdeauna pozitivă, prima condiție va fi satisfăcută cînd toate funcțiile $A^{(m)}$ sînt pozitive, iar a doua, cînd cel puțin unele dintre ele sînt negative. Evident, în punctul de tranziție ele se anulează. Deoarece fizic este prea puțin probabil ca fără nici un motiv special un număr de funcții, independente $A^{(m)}(T, X)$ să se anuleze toate în aceleași condiții: $T = T_c$, $X = 0$, este normal ca o singură funcție să devină zero și deci tranziția va fi legată de o singură transformare fizic ireductibilă, — anume aceea pentru care se anulează coeficientul lui A . Aceasta va fi tocmai reprezentarea după care se și transformă componentele c_α ale parametrului de disimetrie, ce

definește tranziția dată. În consecință, variația funcției de densitate, (66.1), poate fi scrisă sub forma

$$\delta \rho = \sum_{\alpha=1}^n c_{\alpha} \varphi_{\alpha}; \quad (66.4)$$

în condițiile (66.2) pot fi omiși și indicii m .

Chiar în punctul tranziției se pare că primul termen al dezvoltării potențialului termodinamic, care este diferit de zero, este o combinație de invarianti cubici ai parametrului de disimetrie. Invariantii de gradul trei au semnul esențialmente variabil, astfel încât pentru ca potențialul termodinamic să fie minim în punctul tranziției ei trebuie să lipsească din dezvoltarea potențialului. Întrucât pe de altă parte nu există încă nici un motiv să presupunem că coeficienții acestor invarianti se vor anula exact la aceeași temperatură ca și coeficientul lui A , nu ne rămîne decît să cerem ca reprezentarea Γ să nu admită, în general, existența invariantilor de gradul trei, adică, conform lui (66.3), să fie satisfăcută condiția

$$\sum_{g \in G} [\chi_r^3](g) = 0. \quad (66.5)$$

Ea a fost introdusă de L. D. Landau (1937).

Rezultă deci că dezvoltarea potențialului termodinamic este de forma

$$\Phi = \Phi_0 + A \sum_{\alpha=1}^n (c_{\alpha})^2 + \sum_i B_i f_i^{(4)}(c) + \dots, \quad (66.6)$$

în care $f_i^{(4)}(c)$ sînt invarianti de gradul patru, liniar independenți, formați din componentele parametrului de disimetrie, iar B_i — niște funcții de forțe termodinamice generalizate, considerate în primă aproximație constante (de comparat dezvoltările (65.1) și (65.7)).

Condiția lui Landau, (66.5), nu epuizează restricțiile impuse reprezentării Γ , după care s-ar putea transforma parametrul de disimetrie. Este vorba despre faptul că în realitate reprezentările ireductibile ale grupurilor spațiale se numerează cu ajutorul unui parametru continuu — vectorul \mathbf{k} din prima zonă Brillouin a rețelei reciproce și, numai în cazul în care vectorului \mathbf{k} îi corespund cîteva reprezentări ireductibile, numerotarea se mai face și prin numărul m . Din această cauză, coeficienții $A = A(\mathbf{k}; T, X)$. Presupunînd că A sînt funcții suficient de netede de vectorul \mathbf{k} ,

avem

$$A(\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}) = A(\mathbf{k}_0) + \frac{\partial A(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k}} \cdot \delta\mathbf{k} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 A(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{k}} : \delta\mathbf{k} \delta\mathbf{k} + \dots \quad (66.7)$$

Să presupunem că tranziția este legată de reprezentarea $\Gamma(\mathbf{k}_0)$. Atunci în modificarea simetrică toate cantitățile $A(\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k})$, din vecinătatea vectorului \mathbf{k}_0 sînt pozitive; pe măsura apropierii temperaturii de punctul Curie, ele se micșorează, astfel că în fine chiar în punctul de tranziție $A(\mathbf{k}_0)$ ia valoarea zero, $A(\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k})$ rămînînd în continuare tot pozitive. Pentru aceasta este însă necesar ca funcția $A(\mathbf{k})$ să aibă un minim pentru $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, adică din dezvoltarea (66.7) termenii liniari să lipsească, iar cei pătratici să fie pozitivi. Anularea derivatei $\partial A / \partial \mathbf{k}$ pentru $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ se poate datora simetriei vectorului \mathbf{k}_0 . Într-adevăr, această derivată este un vector invariant față de grupul punctual de simetrie, $H(\mathbf{k}_0)$, al vectorului \mathbf{k}_0 . Dacă acest grup nu lasă invariantă nici o direcție, adică aparține unuia dintre cele 22 grupuri punctuale cristalografice nepiroelectrice, derivata $\partial A / \partial \mathbf{k}$, pentru $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ se anulează inevitabil. Celălalt caz pe care ni l-am putea imagina cînd anularea simultană a lui $A(\mathbf{k}_0)$ și $\partial A(\mathbf{k}_0) / \partial \mathbf{k}$ n-ar fi determinată de simetria vectorului \mathbf{k}_0 , ci de proprietățile speciale ale funcției $A(\mathbf{k})$, nici nu poate fi luat în considerație, deoarece în acest caz \mathbf{k} ar trebui să aibă o variație continuă, odată cu variația condițiilor exterioare (de exemplu, presiunea), adică faza disimetrică nu va mai fi un cristal. Prin urmare, reprezentarea fizic ireductibilă, $\Gamma(\mathbf{k})$, legată de o transformare de fază de speța a doua, trebuie să fie caracterizată de un vector \mathbf{k} avînd grupul de simetrie $H(\mathbf{k})$ nepiroelectric. Totodată, din faptul că reprezentarea $\Gamma(\mathbf{k})$ este reală, rezultă că în steaua vectorului \mathbf{k} trebuie să intre și vectorul $-\mathbf{k}$, chiar dacă acest fapt nu este cerut de simetria cristalului, deci în definiția grupului $H(\mathbf{k})$ trebuie înlocuită clasa cristalografică a cristalului prin clasa sa Laue (adică dacă cristalul nu are centru de simetrie, să se adauge la elementele sale de simetrie și un centru de simetrie).

Condiția prezentată mai sus a fost introdusă de E. M. Lifșiț (1941) ca un corolar al condiției mai generale, de aceea, o vom denumi condiția Lifșiț redusă (pentru prezentarea ei s-a apelat și la lucrarea lui Dzealoșinski (1964); la aceeași concluzie a ajuns și Haccaturean (1965), însă pe baza unor considerații întrucîtva diferite).

Dzealoșinski (1964) a remarcat că mai corect ar fi să se pună condiția de anulare a termenului liniar în $\delta\mathbf{k}$ din dezvoltarea potențialului termodinamic după puterile lui $\delta\mathbf{k}$, iar în dezvoltare,

pe lângă termenii deja examinați,

$$\delta \mathbf{k} \cdot \frac{\partial A(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k}} \sum_{\alpha} (c_{\alpha})^2,$$

poate intra — dacă reprezentarea $\Gamma(\mathbf{k}_0)$ nu este unidimensională — și un termen de forma

$$\delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}(c_1, \dots, c_n)$$

în care \mathbf{v} este o mărime pătratică în componentele c_i și care se transformă ca un vector în cadrul tuturor transformărilor din grupul $G_{\mathbf{k}_0}$. Din această cauză, reprezentarea $\Gamma(\mathbf{k})$ trebuie să satisfacă condiția

$$\sum_{g \in G_{\mathbf{k}}} \chi_V(g) [\chi_{\Gamma}^2](g) = 0, \quad (66.8)$$

care cere ca din dezvoltarea potențialului termodinamic să lipsească termenii liniari în $\delta \mathbf{k}$ și cei pătratici în c_{α} . Aici s-a folosit formula (66.3); χ_V este caracterul reprezentării vectoriale, $[\chi_{\Gamma}^2]$ fiind pătratul simetric al caracterului reprezentării Γ . Condiția (66.8) ar trebui desigur să fie denumită condiția Dzealoșinski; ea este ceva mai rigidă decât condiția Lifșiț redusă.

Condiția generală Lifșiț constă în a cere ca componentele parametrului de disimetrie, c_{α} , să nu depindă de coordonatele spațiale. Pentru aceasta este necesar ca potențialul termodinamic Φ , considerat ca funcție de $\partial c_{\alpha} / \partial x_i$, să fie minim pentru $\partial c_{\alpha} / \partial x_i = 0$. Dezvoltarea respectivă are forma

$$\begin{aligned} \Phi = \Phi_0 + \sum_{\alpha, i} a_{\alpha i} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial x_i} + \sum_{\alpha, \beta, i} b_{\alpha \beta i} \left(c_{\alpha} \frac{\partial c_{\beta}}{\partial x_i} + c_{\beta} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial x_i} \right) + \\ + \sum_{\alpha, \beta, i} d_{\alpha \beta i} \left(c_{\alpha} \frac{\partial c_{\beta}}{\partial x_i} - c_{\beta} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial x_i} \right) + \dots, \end{aligned} \quad (66.9)$$

în care $a_{\alpha i}$, $b_{\alpha \beta i}$, $d_{\alpha \beta i}$ sînt niște coeficienți constanți, setul $b_{\alpha \beta i}$ fiind simetric, iar $d_{\alpha \beta i}$ antisimetric la permutarea indicilor α și β . Considerînd potențialul termodinamic al întregului cristal, adică integrala $\int \Phi dV$, ajungem la concluzia că important este numai ultimul termen al dezvoltării (66.9), deoarece, după aplicarea teoremei Gauss-Ostrogradski, ceilalți termeni se reduc la integra-

lele de suprafață ale lui c_α și $c_{\alpha\beta}$. Prin urmare, anularea acestui termen trebuie să rezulte din proprietățile reprezentării Γ . Coeficienții $d_{\alpha\beta i}$ se transformă după reprezentarea $V\{\Gamma^2\}$ — produsul dintre reprezentarea vectorială V a grupului G și pătratul antisimetric al reprezentării Γ . Pe urmă, întrucât coeficienții $d_{\alpha\beta i}$ intră în dezvoltarea potențialului termodinamic, ei trebuie să fie invariante față de grupul G . Numărul acestor invariante este egal cu numărul reprezentărilor unitare din reprezentarea (în general) reductibilă, $V\{\Gamma^2\}$, și pentru ca tranziția să fie posibilă acest număr trebuie să fie egal cu zero

$$\sum_{g \in G} \chi_V(g) \{\chi_\Gamma^2\}(g) = 0. \quad (66.10)$$

Aici am făcut uz de relația (66.3); χ_V este caracterul reprezentării vectoriale a grupului G , iar $\{\chi_\Gamma^2\}$ — pătratul antisimetric al caracterului reprezentării Γ . Expresia (66.10) reprezintă tocmai condiția generală Lifșiț; condiția Lifșiț redusă este o consecință a acesteia; v. Lifșiț (1941); Landau și Lifșiț (1964); Liubarski (1957).

Condițiile (66.8) și (66.10) pot fi considerate condiții mai rigide decât condiția Lifșiț redusă, care poate fi considerată una dintre pietrele unghiulare ale teoriei, determinînd, în mare măsură, caracterul aparatului matematic al acesteia. Vectorii \mathbf{k} , ce satisfac această condiție sînt egali sau cu zero, sau sînt egali cu o doime, o treime sau un sfert din vectorul rețelei reciproce. În primul caz — care a fost studiat amănunțit de către Indenbom (1960) — grupul translațiilor T al fazei simetrice este inclus în nucleul homomorfismului reprezentării Γ , astfel încît aceasta va fi o reprezentare a grupului spațial al modificaliției simetrice; în acest caz, simetria de translație a cristalului, în general, nu se modifică. În celelalte cazuri în nucleul homomorfismului reprezentării Γ va intra nu chiar grupul translațiilor însuși, ci măcar subgrupul său, $T_{\{\mathbf{k}\}}$ de indice nu prea mare; el constă din toate translațiile, $\mathbf{t} \in T$, pentru care $\mathbf{t} \cdot \mathbf{k}$ este egal cu zero sau cu un număr întreg pentru orice \mathbf{k} din steaua $\{\mathbf{k}\}$. Reprezentarea Γ va fi din nou reprezentarea unui grup de ordin finit, nedepășind produsul dintre ordinul grupului punctual al fazei simetrice și indicele lui $T_{\{\mathbf{k}\}}$ în raport cu T . Tocmai aceasta permite să exprimăm proprietățile reprezentării Γ a grupului infinit G în limbajul teoriei grupurilor finite.

Dacă steaua $\{\mathbf{k}\}$ conține cîtiva vectori, atunci grupurile translațiilor care definesc rețelele Bravais posibile, pentru fazele cu simetrie redusă pot fi generate nu de către toți vectorii $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q$, pe care îi cuprinde steaua, ci fie de unul dintre ei (de exemplu, $T_{\mathbf{k}_1}$), fie de o pereche de vectori ($T_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}$, $T_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3}$ etc.), ..., fie de un set de $q - 1$ vectori. Spre deosebire de grupul $T_{\{\mathbf{k}\}}$, care definește

rețele Bravais de aceleași singonii ca ale rețelei inițiale, acestor grupuri le corespund rețele Bravais de singonii mai reduse.

Toate modificările posibile ale rețelei cristaline Bravais au fost calculate de E. M. Lifșiț (1941); ele sînt date în tabelul 66.1. Cînd lucrăm cu el, trebuie să avem în vedere că în afară de simetria de translație a cristalului poate să se reducă și simetria de rotație, iar, drept urmare, rețeaua să se deformeze ușor; acest fapt nu este reflectat în tabel, rețelele Bravais fiind atribuite în tabel sistemului celui mai simetric, căruia, în general, i-ar putea aparține. Dar, oricare ar fi simetria reală a rețelei obținute, în ea vor intra acele, și numai acele noduri, care sînt date în tabel.

În prima și în cea de a doua coloană a tabelului 66.1 sînt cuprinse rețelele Bravais ale modificaliilor simetrică și disimetrică. În a treia coloană modifiția disimetrică este definită prin vectorii bazei, \mathbf{a}_i , ai rețelei primitive, pentru faza simetrică; o celulă cu baza centrată a fazei inițiale este definită de vectorii $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; $1/2 (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$; una cu fețele centrate, prin vectorii $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; $1/2 (\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$, $1/2 (\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1)$, $1/2 (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$; una centrată în volum prin vectorii $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; $1/2 (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$; în rețeaua romboedrică, vectorii \mathbf{a}_i sînt luați după muchiile romboedrului elementar. În coloana a patra este trecut numărul care arată de cîte ori crește numărul de atomi din celula elementară în cazul tranziției de fază, sau, ceea ce este același lucru, de cîte ori se reduce simetria de translație; vom nota acest număr cu N_i .

Tabelul 66.1 arată că perioadele rețelei se dublează în majoritatea cazurilor, în rețelele cu fețele centrate sau cu volum centrat, unele perioade putînd deveni de patru ori mai mari, iar în rețeaua hexagonală de trei ori. Volumul celulei poate crește însă de $N_i = 2, 3, 4, 6, 8, 16$ și 32 ori. Amintim că sînt posibile (și foarte răspîndite) tranziții de fază pentru care simetria de translație nu se modifică (v. § 64).

Să revenim la analiza reprezentării Γ . După cum s-a remarcat deja, grupul $T_{\{K\}}$ face parte din nucleul homomorfismului G_Γ al acestei reprezentări, astfel încît indicele său, $[T : T_{\{K\}}]$ față de grupul translațiilor, T , al modifiției simetrice nu depășește, așa cum rezultă din tabelul 66.1, valoarea 32 (sînt posibile și valori ale indicelui $[T : T_{\{K\}}]$ egale cu valorile lui N_i din tabelul 66.1, pentru acele cazuri în care ambele rețele Bravais fac parte din aceeași singonie). Vom introduce în analiză mărimea $F = G/G_\Gamma$ — factor-grupul grupului spațial al cristalului, G , în raport cu subgrupul său invariant, G_Γ (asupra noțiunii de grup-factor, v., de exemplu, Wigner, 1961). Ordinul grupului F nu depășește produsul dintre indicele $[T : T_{\{K\}}]$ și ordinul grupului punctual al cristalului, K , adică, în orice caz, nu este mai mare de $32 \times 48 = 1536$. Reprezentarea Γ a grupului G servește ca reprezentare, și anume

Tabelul 66 1

Modificările rețelei Bravais în cazul tranzițiilor de fază de speța a doua

$P\bar{1}$	$P\bar{1}$	$2a_1, a_2, a_3$	2
$P2/m$	$P2/m$	$2a_1, a_2, a_3$	2
	$P2/m$	a_1, a_2, a_3	2
	$C2/m$	$2a_1, 2a_2, a_3; a_1 + a_2$	2
$C2/m$	$C2/m$	$a_1, a_2, 2a_3; a_1 + a_2$	2
	$P2/m$	a_1, a_2, a_3	2
	$P\bar{1}$	$a_1 + a_2, \frac{1}{2}(a_1 - a_2), a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1, 2a_2, a_3; a_1 + a_2$	4
$Pmmm$	$Pmmm$	$2a_1, a_2, a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1, 2a_2, a_3; a_1 + a_2$	2
	$Fmmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	2
$Cmmm$	$Cmmm$	$a_1, a_2, a_3; \frac{1}{2}(a_1 + a_2)$	2
	$Pmmm$	a_1, a_2, a_3	2
	$Immm$	$a_1, a_2, a_3; \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + 2a_3)$	2
	$P2/m$	$a_1, a_1 + a_2, \frac{1}{2}(a_1 - a_2)$	2
	$C2/m$	$2a_1, 2a_3, \frac{1}{2}(a_1 + a_2); a_1 + a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1, 2a_2, a_3; a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	4
$Fmmm$	$Cmmm$	$a_1, a_2, a_3; a_1 + a_2$	2
	$P\bar{1}$	$\frac{1}{2}(a_1 + a_2), \frac{1}{2}(a_1 + a_3), a_2 + a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1, 2a_2, \frac{1}{2}(a_1 + a_3); a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	8
$Immm$	$Pmmm$	a_1, a_2, a_3	2
	$C2/m$	$2a_1, 2a_2, \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3); a_1 + a_2$	2
	$Cmmm$	$2a_1, 2a_2, a_3; a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	4
$P4/mmm$	$P4/mmm$	a_1, a_2, a_3	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	2
	$I4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, 2a_3; a_1 + a_3$	2
	$Pmmm$	$2a_1, a_2, a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1, 2a_3, a_2; a_1 + a_3$	2
	$P4/mmm$	$2a_1, 2a_2, a_3$	4
	$I4/mmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_1 + a_2 + a_3$	4
$I4/mmm$	$P4/mmm$	a_1, a_2, a_3	2
	$Cmmm$	$a_1 + a_2, a_3, a_1 - a_2; \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$	2
	$C2/m$	$a_1, a_2 + a_3, a_2 - a_3; \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	4
	$Cmmm$	$2a_1, 2a_3, a_2; a_1 + a_3$	4
	$P2/m$	$2a_1, 2a_2, \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$	4
	$I4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, 2a_3; a_1 + a_3$	4
	$I4/mmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_1 + a_2 + a_3$	8

Tabelul 66.1 (continuare)

$Pm\bar{3}m$	$P4/mmm$	$a_1, a_2, 2a_3$	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	2
	$Fm\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	2
	$P4/mmm$	$2a_1, 2a_2, a_3$	4
	$Im\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_1 + a_2 + a_3$	4
	$Pm\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3$	8
$Im\bar{3}m$	$Pm\bar{3}m$	a_1, a_2, a_3	2
	$Cmmm$	$a_1, a_2 + a_3, a_2 - a_3; \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	4
	$P2/m$	$2a_1, 2a_2, \frac{1}{2}(a_1 + a_2 + a_3)$	4
	$Fm\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	4
	$Im\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_1 + a_2 + a_3$	8
$Fm\bar{3}m$	$P4/mmm$	$\frac{1}{2}(a_1 + a_2), \frac{1}{2}(a_1 - a_2), a_3$	2
	$R\bar{3}m$	$a_1 + \frac{1}{2}(a_2 + a_3), a_2 + \frac{1}{2}(a_3 + a_1),$ $a_3 + \frac{1}{2}(a_1 + a_2)$	2
	$Pm\bar{3}m$	a_1, a_2, a_3	4
	$P2/m$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, \frac{1}{2}(a_1 + a_3)$	4
	$I4/mmm$	$a_1, a_2, 2a_3; a_3 + \frac{1}{2}(a_1 + a_2)$	4
	$Fm\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3; a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	8
	$P4/mmm$	$2a_1, 2a_2, a_3$	16
	$Pm\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3$	32
$R\bar{3}m$	$R\bar{3}m$	$a_2 + a_3, a_3 + a_1, a_1 + a_2$	2
	$C2/m$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, 2a_3; a_1$	2
	$P2/m$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	2
	$C2/m$	$2(a_1 + a_2), 2(a_1 - a_2), a_3; 2a_1$	4
	$R\bar{3}m$	$a_2 + a_3 + a_1, a_3 + a_1 - a_2, a_1 + a_2 - a_3$	4
	$R\bar{3}m$	$2a_1, 2a_2, 2a_3$	8
$P6/mmm$	$P6/mmm$	$a_1, a_2, 2a_3$	2
	$Pmmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, a_3$	2
	$Cmmm$	$a_1 + a_2, a_1 - a_2, 2a_3; a_1 + a_3$	2
	$P6/mmm$	$a_1 + 2a_2, a_1 - a_2, a_3$	3
	$P6/mmm$	$2a_1, 2a_2, a_3$	4
	$Fmmm$	$2(a_1 + a_2), 2(a_1 - a_2), 2a_3; 2a_1, a_1 + a_2 + a_3,$ $a_1 - a_2 + a_3$	4
	$C2/m$	$2a_1, 2a_3, 2a_2; a_1 + a_3$	4
	$P6/mmm$	$a_1 + 2a_2, a_1 - a_2, 2a_3$	6
	$P6/mmm$	$2a_1, 2a_2, 2a_3$	8

Notă: Toți „a” sint, de fapt, vectori.

exactă, pentru grupul F : pentru diferiți $f \in F$ vor corespunde matrice în Γ diferite. Deoarece reprezentarea Γ este reală, în spațiul său purtător, L , se poate lua o bază vectorială a_1, \dots, a_n (n este dimensiunea reprezentării Γ) astfel încât matricele corespunzătoare să fie ortogonale. Așadar, grupul abstract F poate fi realizat sub forma unui anumit grup de transformări ortogonale în spațiul cu n dimensiuni — care să fie subgrupul n -dimensional al grupului ortogonal $O(n)$. Dacă grupul spațial G este simmorf,

atunci ordinele elementelor F sînt, în mod obligatoriu, ordinele cristalografice : 1, 2, 3, 4, 6. Însă reprezentările grupurilor nesimorfe, G , pot genera și grupuri F , avînd unele dintre elemente de ordin necristalografic, de exemplu, 8 sau 12. Dimensiunea n a reprezentării Γ (și totodată a spațiului L) probabil nu este mai mare de 24. (Dimensiunea reprezentărilor ireductibile, care satisfac condiția Lifșiț redusă nu este mai mare ca 12, unele dintre acestea putînd fi complexe.)

Componentele parametrului de disimetrie, c_1, \dots, c_n , le vom considera componente ale unui vector din spațiul L , raportate la baza a_1, \dots, a_n , menționată deja, în care matricele reprezentării sînt ortogonale. Parametrul tranziției este, prin urmare, un vector din spațiul L . Transformările care intră în grupul F , fiind aplicate vectorului de disimetrie, generează steaua vectorilor de disimetrie, $\{c\}$. Dacă nici una dintre reprezentările grupului F nu lasă vectorul c imobil, atunci numărul de vectori din steaua $\{c\}$ este egal cu ordinul grupului F . Dacă însă un anumit subgrup F_c al grupului F lasă vectorul c imobil, atunci numărul de vectori din steaua $\{c\}$ va fi egal cu indicele $[F : F_c]$ al grupului F_c față de F . Vectorii care formează steaua $\{c\}$ corespund unor tipuri de domenii diferite ce iau naștere în cadrul tranziției. Grupul F_c definește univoc grupul spațial al modifiției disimetrice, G_D : el reprezintă reuniunea tuturor claselor de congruență ale grupului spațial G , în raport cu grupul lui invariant, G_I , care corespunde subgrupului F_c , care este grup-factorul $F = G/G_I$:

$$G_D = \sum g_i G_I, \quad (66.11)$$

$g_i \in G$ fiind orice reprezentant al clasei congruente grupului G în raport cu subgrupul G_I , care corespunde elementului f_i al grupului F_c . Dacă, de exemplu, grupul F_c se reduce la unitate, adică nici una dintre transformările neunitare ale grupului F nu lasă vectorul c imobil, atunci grupul G_D coincide pur și simplu cu nucleul homomorfismului lui G_I . Evident, indicele $[G : G_D]$ al grupului G_D în raport cu grupul G , adică reducerea totală a simetriei, în cadrul tranziției de fază, va fi

$$N = [G : G_D] = [F : F_c]. \quad (66.12)$$

Reducerea simetriei de rotație este $N_r = N/N_i$.

Prin urmare, problema inventarierii tuturor grupurilor spațiale, G_D , ale modifițiilor disimetrice, care pot fi puse în legătură cu o modifiție simetrică dată, printr-o tranziție de fază de speța a doua, constă, în primul rînd, în aflarea tuturor reprezentărilor

irreductibile, Γ , ale grupului spațial G al modifi cației simetrice, care satisfac condiția Lifșiț redusă și, în al doilea rînd, în determinarea pentru fiecare grup-factor, $F' = G/G_\Gamma$, a tuturor subgrupurilor, care ar putea servi drept grupuri F_e . Prima etapă a problemei se rezolvă ușor cu ajutorul tabelelor reprezentărilor irreductibile ale grupurilor spațiale (Kovalev, 1961; Fadeev, 1961). Cea de a doua etapă a problemei constă în găsirea pentru grupul F a acelor subgrupuri, care lasă imobil măcar un singur vector; aceste subgrupuri sînt analogurile n -dimensionale ale claselor piroelectrice (această problemă reprezintă deci generalizarea pentru n dimensiuni a problemei analoage, rezolvate în cadrul tridimensional de Jeludev și Șuvalov (1956) în cadrul inventarierii tuturor tranzițiilor seignettoelectrice posibile). Toate matricele care intră într-un subgrup de acest fel au cel puțin o valoare proprie egală cu 1. Apoi, toate matricele care în ansamblu formează un astfel de subgrup au cel puțin un vector propriu comun, care corespunde valorii proprii 1.

Etapa următoare a cercetării ar fi trebuit să conste în excluderea tuturor tranzițiilor de fază „excedentare”. În afară de tranzițiile ce corespund unor reprezentări care nu satisfac condițiile (66.5), (66.8) sau (66.10), există printre ele unele care pot fi obținute numai luînd în dezvoltarea (66.6) și termenii următori. Pentru eliminarea acestor tranziții (printre ele fiind, în particular, cele corespunzătoare grupurilor F_e , care sînt, la rîndul lor, subgrupuri ale altor grupuri de același fel), se poate verifica dacă grupul dat, G_D , poate sau nu să fie obținut prin procedura obișnuită de rezolvare : înlocuirea dezvoltării (66.6) în ecuația (66.2), rezolvarea acestor ecuații și determinarea grupurilor spațiale, G_D , față de care expresia (66.4) să fie invariantă, după înlocuirea în ea a soluțiilor obținute.

Pe urmă, în afara tranzițiilor de speța a doua, prezintă interes și tranzițiile de speța întîi, apropiate de cele de speța a doua. Pentru tratarea lor teoretică se folosesc metodele utilizate în teoria tranzițiilor de fază de speța a doua, însă întrucîtva modificate (v., de exemplu, studiul tranzițiilor seignettoelectrice de speța întîi, de Ghinzburg, 1949). Firește, o delimitare perfect riguroasă a acestor tranziții nu este posibilă ; mai degrabă, faptul în sine că tratarea problemei simetriei și proprietăților cristalului în apropierea temperaturii de tranziție este posibilă folosind o variantă a teoriei tranzițiilor de fază de speța a doua confirmă tocmai apropierea ce există între aceste tranziții și tranzițiile de speța a doua. Din acest punct de vedere, lista grupurilor G_D , obținute pe baza formulei (66.11) poate fi considerată o listă ce include totodată și tranzițiile de speța întîi. Remarcăm că considerentele pe baza cărora se demonstrează că parametrul de disi-

metrie, c , se transformă pentru o tranziție de speța a doua după o reprezentare fizic ireductibilă, în cazul unei transformări de speța întâi devin mult mai puțin categorice. Întrucât anularea celor doi coeficienți $A^{(m)}$ într-un interval îngust de temperatură, cu toate că este puțin probabilă, nu poate fi considerată complet exclusă, este normal să presupunem că nu toate transformările de speța întâi, dar o mare parte dintre ele, pot fi definite printr-o reprezentare fizic ireductibilă (este posibil ca dintre transformările definite prin reprezentări reductibile să facă parte și tranziția $Pm3m - Pnma$, observată într-o serie de cristale — de exemplu, în $CaTiO_3$; v. Cochran, Zia, 1968). Pentru grupul spațial $Pm3m(O_h^1)$ se poate confrunta lista tranzițiilor de speța a doua (Aleksandrov, Zinenko, Mihelson, Sirotin, 1969) cu lista care include și tranzițiile de speța întâi, definite printr-o reprezentare fizic ireductibilă (Vinberg, Gufan, Sahnenko, Sirotin, 1974).

Așa apare metoda geometrică de găsire a grupurilor spațiale G_D ale unei modifi cații disimetrice, legate de modifi cația simetrică (G) printr-o tranziție de fază de speța a doua, sau printr-o tranziție de speța întâi, apropiată de ea (Sirotin, 1967; Sirotin și Mihelson, 1969; Gufan, 1971; Vinberg, Gufan, Sahnenko, Sirotin, 1974). Analiza grupurilor F și F_c , care acționează într-un spațiu abstract al reprezentării Γ , care, la prima vedere, n-ar avea nici un sens fizic, își găsește justificarea în faptul că fiecare dintre aceste grupuri reunește o întreagă mulțime de transformări, iar apartenența tranzițiilor la un anumit grup determină numeroasele lor proprietăți comune, care ne scapă la o analiză superficială. Astfel de tranziții sînt tocmai cele descrise în § 65, din subgrupul cu indicele 2: cu toate că prin modul de manifestare ele sînt extrem de variate, o parte considerabilă a abordării lor teoretice reușește într-o formă unitară, ieșind astfel în evidență trăsăturile comune ale tuturor acestor tranziții. În principiu, o analiză analoagă se poate face probabil și pentru tranzițiile definite și de alte grupuri F și F_c . Deocamdată această metodă este folosită pentru studiul diferitelor tranziții (Sirotin, 1967; Sirotin și Mihelson, 1969; Gufan și Sahnenko, 1972) ale variației proprietăților fizice, ale analizei structurii domeniale ce ia naștere în cadrul unei tranziții ș.a. (v., de asemenea, cercetările analoage realizate prin metode obișnuite — Levaniuk și Sannikov, 1970; Dvořak, Dvořak, Petzelt, 1971). Pe lângă aceasta, s-au scos în evidență o serie de proprietăți comune ale tranzițiilor de fază, legate de reprezentările bidimensionale și reprezentările tridimensionale, s-au găsit toate grupurile posibile F și F_c pentru astfel de reprezentări (Gufan și Sahnenko, 1972, a).

Schimbările proprietăților fizice ale cristalului la o tranziție de fază sînt determinate calitativ de grupurile punctuale ale faze-

lor simetrică și disimetrică. Astfel, transformarea este seignetto-electrică, adică legată de apariția polarizării spontane, în cazul și numai în cazul în care numărul de componente independente ale vectorului pentru grupurile punctuale ale fazelor simetrică și visimetrică este diferit (v. Jeludev și Șuvalov, 1956). Exact la fel, pentru a apărea o deformare spontană, în cazul unei tranziții de fază, este necesar și suficient ca pentru aceste grupuri punctuale numărul de componente independente ale tensorului simetric de rangul doi să fie diferit. Aceste rezultate pot fi precizate incomparabil mai riguros dacă se ține cont și de poziția pe care o are reprezentarea Γ în sistemul de reprezentări ale grupului punctual K . Polarizarea spontană apare într-o tranziție de fază atât în cazul în care în reprezentarea vectorială V a grupului K intră însăși reprezentarea Γ , cât și în cazul în care în V intră numai o putere oarecare simetrică $[\Gamma^p]$ a acestei reprezentări. În primul caz însă, variațiile în funcție de temperatură ale polarizării spontane și ale permitivității dielectrice sînt determinate prin relațiile (65.30) și (65.31). În al doilea caz, polarizarea spontană crește odată cu îndepărtarea de punctul de tranziție, ca $|\Theta|^{p/2}$, pe cînd permitivitatea dielectrică nu mai tinde la infinit pentru $\Theta \rightarrow 0$; astfel de tranziții se numesc acum tranziții improprii; posibilitățile existenței lor au fost semnalizate pentru prima dată de Indenbom (1960, a); pentru amănunte asupra lor, vezi Lavaniuk și Sannikov, 1974. Analog, și tranzițiile ce au loc cu apariția unei deformări spontane se împart în tranziții proprii, cînd în reprezentarea $[V^2]$ a grupului K intră însăși reprezentarea Γ , și tranziții improprii, cînd în $[V^2]$ intră numai gradele lui simetrice. Dacă în cadrul tranziției se modifică simetria de tranziție a cristalului, atunci această tranziție va fi improprie în raport cu toate proprietățile fizice, dat fiind că în reprezentările grupului punctual K , oricare ar fi ele, nu pot intra decît puterile simetrice ale reprezentării Γ , dar nu ea însăși.

Analiza teoretică a teoriei grupurilor permite să se explice, de asemenea, dacă tranziția dată implică sau nu deplasări ale pozițiilor de echilibru ale atomilor: în primul caz reprezentarea Γ va face parte din reprezentarea de vibrație a grupului spațial G , al doilea nu. Această proprietate a tranziției depinde în mod esențial de tipul structural al cristalului, deoarece tocmai acesta determină însăși constituția reprezentării de vibrație a grupului spațial dat. În particular, în structurile care conțin atomi în stare grupată, orice transformare este însoțită de deplasări ale atomilor. Dimpotrivă, în structurile monoatomice, tranziția va fi însoțită de o deplasare a atomilor numai în cazul în care repre-

zentarea grupului punctual $H(\mathbf{k})$, generat de reprezentarea mică, Γ_k , face parte din reprezentarea vectorială a grupului $H(\mathbf{k})$. Toate tranzițiile seignettoelectrice implică deplasări ale atomilor. Dintre tranzițiile ce nu pot fi însoțite de deplasări ale atomilor fac parte, de exemplu, transformările de fază din salpetru de sodiu și din aliajul CuZn (v. fig. 64.2 și tab. 64.1). Mai detaliat, pentru aceasta, vezi Sirotin și Mihelson (1968); Mihelson și Sirotin (1969).

Referitor la problemele abordate în acest capitol, se pot consulta lucrările: Burfoot (1970); Browt (1967); Vaks (1973); Jeludev (1968, 1969, 1973); Jona și Shirane (1965); Känzig (1960); Cady (1949); Landau și Lifșit (1957 și 1964); Liubarski (1957); Mason (1952); Pasinkov și Șur (1971); Smolenski și Krainik (1968); Sonin și Stukov (1970); Haceaturean (1974).

SIMETRIA MAGNETICĂ ÎN FIZICA CRISTALELOR

§ 67. INVERSIA TIMPULUI ȘI ANTISIMETRIA

Începutul simetriei magnetice a cristalelor se poate considera anul 1951, cînd a văzut lumina tiparului volumul cursului de fizică teoretică a lui L. D. Landau și E. M. Lifșit, „Fizica statistică” și monografia lui A. V. Șubnikov, „Simetria și antisimetria figurilor finite”. În „Fizica statistică” s-a remarcat că studiind simetria cristalelor magnetice, este necesar să se examineze operația de inversie temporală și combinațiile acesteia cu translațiile și cu rotațiile obișnuite de oglindire și elicoidale. Landau și Lifșit au menționat că în acest caz se vor obține noi grupuri, în număr foarte mare, care nu fuseseră încă obținute de cineva — grupurile spațiale ale simetriei magnetice a cristalelor. Să examinăm în acest sens operația de inversie a timpului.

La baza fizicii cristalelor stau legile mecanicii clasice și ale electrodinamicii. După cum se știe, ele sînt invariante față de grupul rotațiilor: rotația sistemului de coordonate în care sînt scrise nu modifică forma acestor legi. Ele sînt invariante și față de grupul ortogonal, adică față de mulțimea tuturor rotațiilor proprii și improprii posibile; trebuie să se țină seama că în cazul rotațiilor neproprii, vectorii cîmpului electric și cîmpului magnetic se transformă diferit: primii ca niște vectori obișnuiți (polari), iar ceilalți ca vectori axiali (pseudovectori).

Mai mult decît atît, legile mecanicii și electrodinamicii sînt invariante și față de transformarea $t' = -t$, adică față de *inversia timpului*, numai dacă se schimbă simultan și semnele componentelor vectorului magnetic: $H'_i = -H_i$. Această lege de transformare rezultă natural din tabloul fizic al fenomenului: în cazul inversiei timpului, sensul tuturor curenților se inversează, inversîndu-se deci și sensurile tuturor cîmpurilor magnetice; doar cîmpurile magnetice sînt produse de curenții electrici.

Transformarea $t' = -t$ se numește *inversia timpului*. O vom nota cu I' ; grupul care constă din elementul unitate și inversia timpului va fi notat cu $1'$. Firește, inversia timpului nu este fizic realizabilă, însă la fel este și inversia obișnuită. Nu numai timpul nu poate fi făcut s-o ia înapoi; exact la fel nu putem transforma un cristal de cuarț în enantiomorful lui: pentru

aceasta ar trebui să desfacem mai întâi cristalul în atomii constituenți și apoi să construim atomii într-o altă ordine (în general, să se descompună corpul enantiomorf în părțile sale componente neenantiomorfe și să se construiască, din nou, cu ele, corpul enantiomorf; existența unor asemenea părți componente neenantiomorfe pentru un anumit grad de divizare este condiția necesară pentru realizarea principială a acestei operații). Definiția transformării de simetrie trebuie, pur și simplu, să nici nu implice ipoteza posibilității realizării fizice a acestei transformări.

Dacă atașăm grupului ortogonal $\infty\infty I$ (în acest context notația $\infty\infty I$ este mai comodă decât notația echivalentă, folosită în mcd curent, $\infty\infty m$) operația de inversie a timpului, I' , și toate combinațiile ei posibile cu rotațiile proprii și cu rotațiile de inversie se obține *grupul ortogonal extins*, $\infty\infty I I'$. Legile fundamentale ale fizicii sînt invariante față de acest grup. Acestea sînt invariante și față de transporturi (translații). Toate combinațiile posibile ale transporturilor cu operațiile grupului ortogonal extins constituie în ansamblul lor *grupul euclidian extins*.

Toate transformările de simetrie ale unui cristal, luate în ansamblu, formează grupul de simetrie al cristalului. Dacă el cuprinde numai transformările care lasă invariante legile fizicii, este firesc să fie denumit *grupul simetriei fizice* a cristalului. Toate grupurile cristalografice punctuale și spațiale precum și toate subgrupurile cristalografice ale grupurilor euclidiene extinse și ortogonale extinse sînt grupuri de acest fel.

Să trecem acum la ideea de antisimetrie. Prima dintre simetrii este generalizarea noțiunii de egalitate: pe lângă figurile egale se studiază și figurile *antieegale*. Cel mai simplu exemplu de figuri antieegale îl constituie două figuri geometrice egale, însă colorate invers: o figură neagră este antieegală aceleiași figuri albe, iar cea albă celei negre. Astfel în schița lui Escher „Ziua și noaptea” (fig. 67.1) orașul în negru (noaptea) este antieegal cu orașul în alb (ziua), râul în negru, râului în alb, păsările în negru, păsărilor în alb.

În general pot fi considerate egale, după cum arată Șubnikov, figurile de aceleași dimensiuni, care sînt contrare una față de alta, în raport cu o anumită caracteristică: culoarea, semnul sarcinii electrice, sensul momentului magnetic etc. Prin urmare, culoarea albă sau neagră a unei figuri nu este altceva decât exprimarea convențională a faptului că, în afară de proprietățile geometrice, această figură mai are și o altă proprietate oarecare, proprietate ce poate fi exprimată printr-o mărime care poate lua doar două valori, să zicem $+1$ și -1 . În cadrul simetriei pot fi analizate și acele proprietăți definite printr-o mărime care poate lua trei valori: $+1$, -1 și 0 . Aceasta corespunde în a lua în considerație, în afară de figurile albe sau negre și figurile cenușii, ori alături

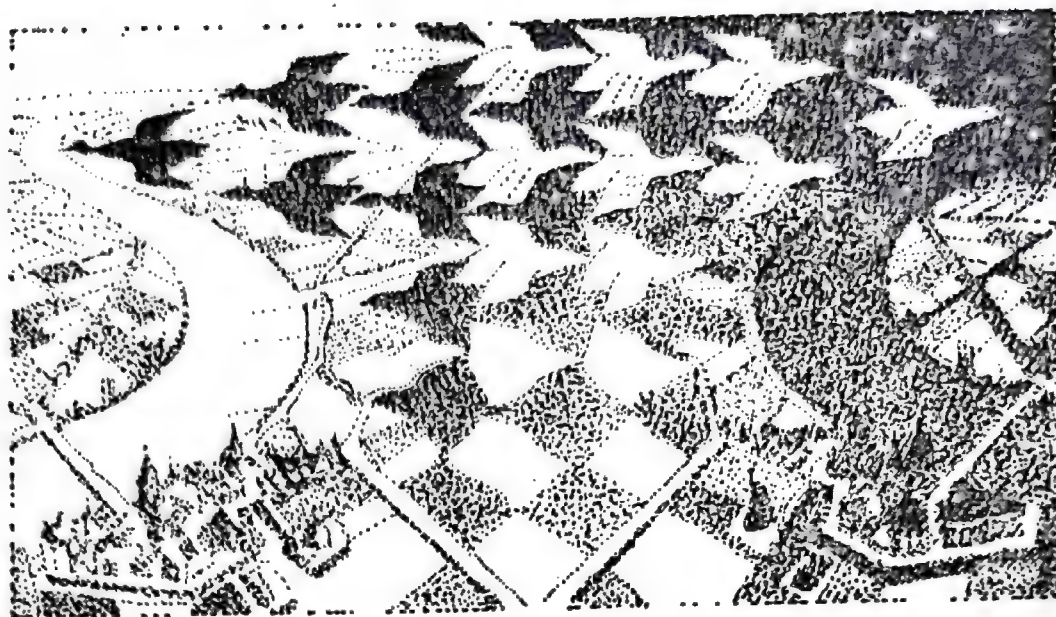


Fig. 67.1. Escher — „Noapte și zi”.

de corpurile încărcate pozitiv sau negativ, și corpurile lipsite de sarcină electrică, neutre.

Pe lângă operațiile de simetrie se introduc *operațiile de antisimetrie*. În timp ce o operație de simetrie transformă o figură într-una la fel, adică într-o figură egală, operația de antisimetrie o transformă într-o figură antiegală. Prin urmare, se poate defini *operația de antiidentificare* și toate combinațiile sale posibile cu transformările ortogonale.

Operația de antiidentificare, I' (Șubnikov utilizează pentru această operație simbolul \underline{I} , însă sistemul de notații utilizat de el este în general diferit de cel internațional), aplicată în cazul figurilor albe-negre, constă în recolorare: tot ce pînă la această operație era colorat în alb, după aceasta devine negru, pe cînd tot ce era negru devine alb. Dacă imaginăm figurile nu colorate, ci încărcate electric, efectul aplicării operației de antiidentitate constă în inversarea semnului sarcinii.

Evident nu există vreo figură albă sau vreo figură neagră care să poată fi invariantă față de operația de antiidentificare. Din această cauză, pe lângă figurile negre și figurile albe se introduc și figurile cenușii, care, prin definiție, se transformă în ele însele ca urmare a antiidentificării. Dacă se admite interpretarea „electrică” a antiidentificării, adică dacă se consideră că antiidentificarea transformă un corp în el însuși, dar cu semnul schimbat, este clar că sînt invariante față de antiidentificare toate corpurile neîncărcate, electric neutre.

Combinațiile antiidentificării cu rotațiile simple și cu rotațiile cu oglindire se numesc *antirotații* și se notează cu simbolurile cores-

punzătoare rotațiilor, scrise cu semnul „prim” (după Șubnikov, cu minus sub semnul rotației). Antirotatia este transformarea care constă dintr-o rotație și o recolorare; nu contează ordinea în care se fac operațiile.

Se numesc *grupuri punctuale de antisimetrie* (în sensul larg al cuvântului) grupul format din toate rotațiile și antirotațiile simple și cu oglindire posibile și toate subgrupurile lui. Dintre acestea din urmă fac parte și grupurile de simetrie normale, G ; în compunerea lor intră numai rotațiile obișnuite — simple și cu oglindire. Aceste grupuri se reprezintă numai prin figuri monocromatice, sau, cum se exprimă Șubnikov, prin figuri *polare* (de obicei, ele sînt desenate în culoare albă, dar la fel de bine ar putea fi colorate și în negru). Grupurile care conțin operația de antiidentificare „în ele însele” se notează cu $G1'$, fiindcă se reprezintă la fel cu G , dar cu desene cenușii; pe aceste figuri Șubnikov le numește figuri *neutre*. În sfîrșit, grupurile cu adevărat noi, adică grupurile G' , care cuprind în structura lor antirotații, însă care nu conțin antiidentificări, sînt reprezentate prin figuri care au atît părți albe cît și părți negre; acestea sînt figurile cu *polaritate mixtă*. Aceste denumiri se extind și la grupuri: G — grupuri polare, sau grupuri albe; $G1'$ — grupuri neutre sau grupuri cenușii; G' — grupuri de polaritate mixtă, sau grupurile alb-negre. Menționăm că sub denumirea de grupuri de antisimetrie se înțeleg adesea numai grupurile de polaritate mixtă. Unele imagini ce ilustrează cîteva dintre aceste grupuri sînt date în figura 67.2.

Cînd Tavgher și Zaițev (1956), urmărind ideile expuse în „Fizica statistică”, au dedus grupurile punctuale ale simetriei magnetice a cristalelor, s-a constatat că ele sînt izomorfe grupurilor punctuale de antisimetrie, descrise în cartea lui Șubnikov. Așadar, grupurile de simetrie magnetică ale cristalelor se deosebesc numai ca interpretare de grupurile de antisimetrie. Mai exact, dintre numeroasele interpretări posibile ale grupurilor punctuale de antisimetrie, este posibilă și interpretarea lor ca grupuri de simetrie magnetică; tocmai această interpretare ne duce la grupurile de simetrie fizică a cristalelor. Avînd în vedere această interpretare, am notat operația de antiidentificare cu același simbol, $1'$, ca și inversia timpului.

După ce Șubnikov a emis ideea că este posibil și, mai mult decît atît, necesar să se generalizeze teoria clasică a simetriei, a făcut el însuși primii pași în acest sens, prin construirea grupurilor punctuale de antisimetrie; aceste cercetări au interesat un mare număr de cercetători. Curînd după aceea au fost definite grupurile spațiale de antisimetrie (Zamorzaev, 1953, 1957; Belov, Neronova, Smirnova, 1955, 1957) propunîndu-se generalizarea în continuare a simetriei clasice — simetria cromatică (Belov și

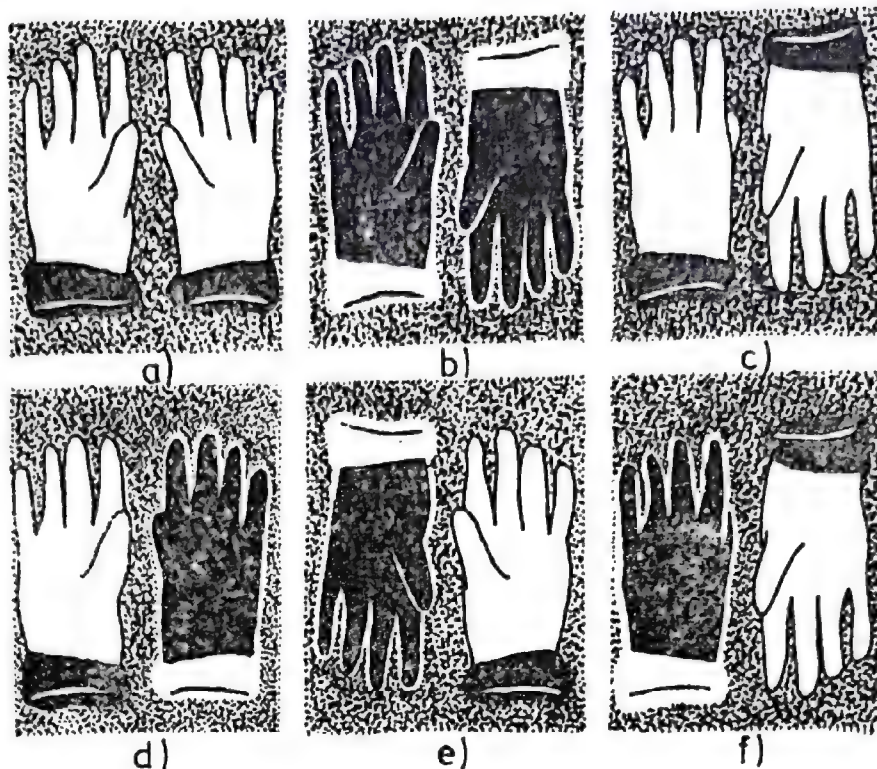


Fig. 67.2. Cele mai simple figuri simetrice (a, b, c) și antisimetrice (d, e, f), după Șubnikov. Simetria figurilor : a) plan de simetrie, m ; b) axă de simetrie 2 ; c) centru de simetrie, $\bar{1}$; d) plan de antisimetrie m' ; e) axă de antisimetrie, $2'$; f) centru de antisimetrie, $1'$.

Tarhova, 1956 ; Indenbom, Belov, Neronova, 1960 ; Zamorzaev, 1967, 1970). Multitudinea de generalizări ale teoriei clasice poate fi supusă unor clasificări și dedusă plecând de la o poziție unică, prin aplicarea metodelor teoriei extinderii grupurilor (Șubnikov și Koptik, 1972).

§ 68. GRUPURILE PUNCTUALE ALE SIMETRIEI MAGNETICE

Se numesc grupuri punctuale de simetrie magnetică grupul ortogonal extins și toate subgrupurile lui. Un grup ortogonal extins constă din toate transformările ortogonale posibile, g , precum și din aceste transformări, înmulțite cu inversia timpului ; le vom nota cu g' . Din faptul că inversia timpului comută cu toate transformările ortogonale, pătratul ei fiind transformarea identică, rezultă următoarele reguli ale înmulțirii :

$$g_i g_j = g_k, \quad g_j g_i = g_l,$$

atunci

$$\begin{aligned} g'_i g_j &= g'_k, & g_j g'_i &= g'_i, \\ g_i g'_j &= g'_k, & g'_j g_i &= g'_i, \\ g'_i g'_j &= g_k, & g'_j g'_i &= g_i. \end{aligned} \quad (68.1)$$

Vom examina grupurile cristalografice (adică cele ce conțin rotațiile și antirotațiile numai cu unghiurile $\pi/2$, $\pi/3$ și multiplii lor) și grupurile limită ale simetriei magnetice. Uneori, sînt numite și *clase de simetrie magnetică*.

Desigur, ele vor cuprinde, în primul rînd, cele 32 grupuri cristalografice obișnuite și cele 7 grupuri limită. Aceste grupuri pot fi considerate grupuri de simetrie magnetică, care nu conțin nici un fel de antirotații, inclusiv inversia timpului. Ele sînt grupurile albe sau polare, G .

Apoi, în cadrul grupurilor punctuale ale simetriei magnetice intră 39 de grupuri cenușii (neutre), $G1'$: 32 de grupuri cristalografice și 7 limită. Fiecare dintre ele conține inversia timpului, iar orice rotație g intră în grup împreună cu antirotația corespunzătoare, g' .

În fine, cel de al treilea grup al simetriei magnetice este format de grupurile alb-negre, sau grupurile de polaritate mixtă, G' . Inversia timpului nu este cuprinsă în nici una dintre ele, însă împreună cu rotațiile proprii ori rotațiile cu inversie, h_1, \dots, h_k , ele conțin obligatoriu și antirotațiile, g'_1, \dots, g'_i . Deoarece în grup nu intră I' , nici una dintre operațiile g , nu coincide cu nici una dintre operațiile h_i . Rotațiile h_i constituie grupul H , care este un subgrup cristalografic (adică nemagnetic) al grupului G' , iar antirotațiile formează mulțimea $G' - H$.

Luînd o anumită antirotație dată, g'_j , să examinăm toate produsele posibile, $g'_j h_i$, în care h_i parcurge întregul grup H . Toate aceste produse sînt diferite, iar în virtutea relației (68.1) aparțin mulțimii $G' - H$. Din această cauză, numărul elementelor din această mulțime nu este mai mare decît cel din grupa H . Pe de altă parte, analizînd toate produsele $g'_j g'_i$ posibile, pentru un g'_j dat cînd elementele g'_i parcurg toată mulțimea $G' - H$, găsim că și acestea sînt toate diferite, iar în virtutea expresiei (68.1), aparțin grupului H , astfel încît numărul de elemente din el nu este mai mic decît în $G' - H$. Este cît se poate de clar că aceste numere sînt pur și simplu egale, iar H este un subgrup al grupului G' , de indice 2.

Omițînd accentele elementelor g' , din orice grup alb-negru se poate obține grupul G' al grupului cristalografic $G = \{h_1, \dots,$

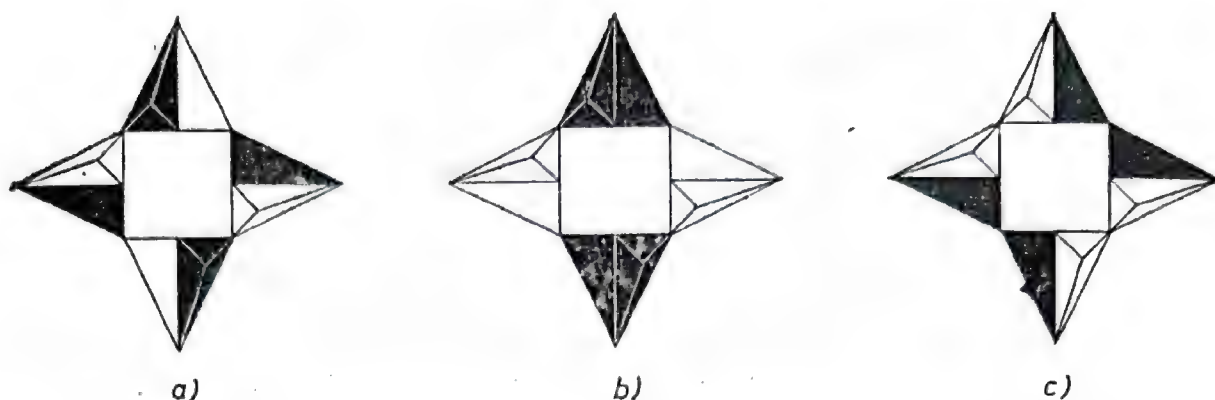


Fig. 68.1. Figuri din tetraedre albe și negre care aparțin grupurilor punctuale de antisimetrie legate de grupul cristalografic $G = \bar{4}2m$: a) $G' = 42'm'$; b) $G' = 4'2m'$; c) $G' = \bar{4}'2'm$.

h_k, g_1, \dots, g_k . Și invers, din orice grup cristalografic G , din care face parte subgrupul H , de indice 2, se poate obține grupul alb-negru, G' , înmulțind elementele g_j , care nu intră în subgrupul H , cu inversia timpului. Ansamblul rotațiilor, h_i , și antirotațiilor, g'_j , formează grupul alb-negru căutat, G' ; cu această metodă se pot obține toate grupurile de acest fel.

Să deducem, de exemplu, care grupuri alb-negre se pot obține din grupul $\bar{4}2m$. Acest grup este un grup de ordinul opt. El are trei subgrupuri cu indicele 2, și anume, 222 și $mm2$. Să le examinăm pe rînd. Dintre elementele subgrupului $\bar{4}2m$

intră în subgrupul $\bar{4}$:	$1, 2_z, \bar{4}_z, \bar{4}_z^3$;
nu intră în subgrupul $\bar{4}$:	$2_x, 2_y, m_u, m_v$;
intră în subgrupul 222 :	$1, 2_x, 2_y, 2_z$;
nu intră în subgrupul 222 :	$\bar{4}_z, \bar{4}_z^3, m_u, m_v$;
intră în subgrupul $mm2$:	$1, 2_x, m_u, m_v$;
nu intră în subgrupul $mm2$:	$2_y, 2_z, \bar{4}_z, \bar{4}_z^3$.

Înlocuind transformările ortogonale corespunzătoare rotațiilor, care nu intră în subgrupul H , vom ajunge la următoarele trei grupuri alb-negre

$$\{1, 2_x, \bar{4}_z, \bar{4}_z^3, 2'_y, 2'_z, m'_u, m'_v\} = \bar{4}2'm';$$

$$\{1, 2_x, 2_y, 2_z, \bar{4}'_z, \bar{4}_z^3, m'_u, m'_v\} = 4'2m';$$

$$\{1, 2_x, m_u, m_v, 2'_y, 2'_z, \bar{4}'_z, \bar{4}_z^3\} = \bar{4}'2'm;$$

ele sînt reprezentate în figura 68.1.

Celelalte grupuri cristalografice alb-negre se obțin ușor prin aceeași metodă (v., de exemplu, fig. 68.2).

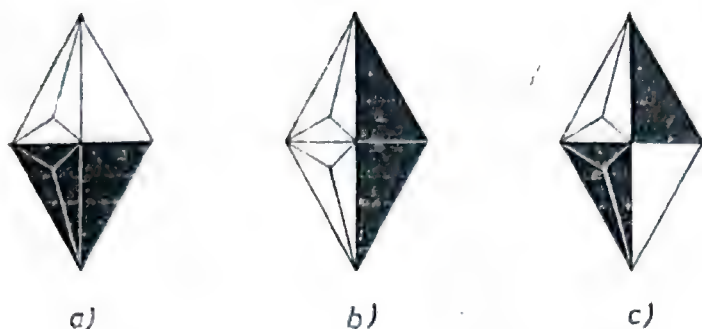


Fig. 68.2. Figuri de tetraedre albe și negre, care aparțin grupurilor punctuale de antisimetrie legate de grupul cristalografic $G = 2/m$: a) $G' = 2/m'$; b) $g' = 2'/m$; c) $G' = 2'/m'$.

În tabelul 68.1 sînt enumerate toate grupurile cristalografice și grupurile limită*, G , subgrupurile lor, H , de indice 2, și grupurile alb-negre corespunzătoare, G' . Calculul arată că există 58 de grupuri alb-negre cristalografice și 7 grupuri alb-negre limită. Dar în total, numărul de grupuri punctuale ale simetriei magnetice de diferite tipuri este de 143 : 122 grupuri cristalografice și 21 grupuri limită.

Notățiile internaționale ale grupurilor cristalografice ale simetriei magnetice sînt definite prin următoarele reguli :

1) grupul polar (alb), G , se notează exact la fel cu grupul cristalografic format din aceleași transformări ;

2) grupul neutru (cenușiu), $G1'$, se notează cu simbolul care corespunde grupului cristalografic G , cu adăugarea lui $1'$; de exemplu, $321'$, $m3m1'$; faptul că grupul este neutru este desemnat și prin existența în simbol a semnelui $3'$; astfel, în loc de $321'$ și $m3m1'$ se poate scrie $3'2$ și, respectiv, $m3'm$;

3) notarea unui grup de polaritate mixtă (grup alb-negru), G' , se deosebește de notația internațională care corespunde grupului cristalografic G numai prin faptul că operațiile menționate în el se notează cu semnul prim ; de exemplu, $m'3m$ înseamnă că inversia timpului este însoțită de reflexia în planurile $\{100\}$, $m3m'$, în planurile $\{110\}$, iar $m'3m'$, în unele sau în altele**.

Grupurile cristalografice ale simetriei magnetice se utilizează pentru exprimarea simetriei cristalelor ținînd seama de ordonarea magnetică a structurii lor, pe cînd grupurile limită pot fi folosite,

* Cea mai simplă deducere a grupurilor alb-negre se bazează pe următoarea teoremă : dacă grupul punctual G are o reprezentare cu semne contrare (adică o reprezentare care constă din cifrele 1 și -1), atunci se poate construi grupul alb-negru, G' , păstrînd neschimbate acele elemente ale grupului G , cărora, în această reprezentare cu semne contrare, le corespunde 1, pe celelalte înmulțindu-le cu inversia timpului (Indenbom, 1969).

** Alături de notațiile internaționale ale grupurilor punctuale ale simetriei magnetice, se utilizează și notațiile Șubnikov. Ele se obțin din notațiile Șubnikov ale grupurilor cristalografice aproape cu ajutorul aceluiași reguli. Singura deosebire constă în faptul că în loc de semnul prim se utilizează semnul minus sub simbolul respectiv ; de exemplu, grupurile $\bar{4}2'm'$, $\bar{4}'2m'$ și $\bar{4}'2'm$, conform notațiilor Șubnikov, sînt $\bar{4} : 2$, $4 : 2$ și, respectiv, $\bar{4} : 2$.

Tabelul 68.1

Grupurile alb-negre cristalografice și grupurile alb-negre limită ale simetriei magnetice

G	H	G'	G	H	G'	G	H	G'
$\bar{1}$	—	—	$4/m$	$\bar{4}$	$4'/m'$	$6m2$	$3m$	$\bar{6}'m2'$
$\bar{1}$	1	$1'$	422	222	$4'22'$	$6m2$	$\bar{6}$	$6m'2'$
2	1	$2'$	422	4	$42'2'$	$6/mmm$	$3m$	$6'/m'mm'$
m	1	m'	$4mm$	$mm2$	$4'mm'$	$6/mmm$	$6/m$	$6/mm'm'$
$2/m$	$\bar{1}$	$2'/m'$	$4mm$	4	$4m'm'$	$6/mmm$	622	$6/m'm'm'$
$2/m$	2	$2/m'$	$\bar{4}2m$	222	$\bar{4}'2m'$	$6/mmm$	$6mm$	$6/m'mm$
$2/m$	m	$2'/m$	$\bar{4}2m$	$mm2$	$\bar{4}'2'm$	$6/mmm$	$\bar{6}m2$	$6'/mmm'$
222	2	$22'2'$	$\bar{4}2m$	4	$42'm'$	23	—	—
$mm2$	2	$m'm'2$	$4/mmm$	mmm	$4'/mmm'$	m3	23	$m'3$
$mm2$	m	$mm'2'$	$4/mmm$	$4/m$	$4'/mm'm'$	432	23	$4'32'$
mmm	$2/m$	$mm'm'$	$4/mmm$	422	$4'/m'm'm'$	$\bar{4}3m$	23	$\bar{4}'/3m'$
mmm	222	$m'm'm'$	$4/mmm$	$4mm$	$4'/m'mm$	$m3m$	m3	$m3m'$
mmm	$mm2$	mmm'	$4/mmm$	$\bar{4}2m$	$4'/m'm'm$	$m3m$	432	$m'3m'$
3	—	—	6	3	$6'$	$m3m$	$\bar{4}3m$	$m'3m$
$\bar{3}$	3	$3'$	$\bar{6}$	3	$\bar{6}'$	∞	—	—
32	3	$32'$	$6/m$	3	$6'/m'$	∞/m	∞	∞/m'
$3m$	3	$3m'$	$6/m$	$\bar{6}$	$6'/m'$	$\infty 2$	∞	$\infty 2'$
$\bar{3}m$	3	$\bar{3}m'$	$6/m$	$\bar{6}$	$6'/m$	∞m	∞	$\infty m'$
$\bar{3}m$	32	$\bar{3}'m'$	622	32	$6'22'$	∞/mm	∞/m	∞/mm'
$\bar{3}m$	3m	$\bar{3}'/m$	622	6	$62'2'$	∞/mm	$\infty 2$	$\infty/m'm'$
4	2	$4'$	$6mm$	3m	$6'mm'$	∞/mm	∞m	$\infty/m'm$
$\bar{4}$	2	$\bar{4}'$	$6mm$	6	$6m'm'$	$\infty\infty$	—	—
$4/m$	$2/m$	$\bar{4}'/m$	$\bar{6}m2$	32	$\bar{6}'m'2$	$\infty\infty m$	$\infty\infty$	$\infty\infty m'$
$4/m$	4	$4/m'$						

în particular, pentru caracterizarea simetriei mărimilor care figurează în sistemul de ecuații Maxwell.

Sarcina electrică, e. Aceasta este un scalar, care nu-și schimbă semnul la inversia timpului. Așadar, acest scalar va fi invariant la toate transformările grupului ortogonal extins $\infty\infty\bar{1}1'$, care tocmai din această cauză, trebuie considerat, de fapt, grupul lui de simetrie. Aceeași este, firește, și simetria masei, m .

Intensitatea câmpului electric, E. Acesta este un vector polar, care nu-și modifică sensul la inversia timpului. Grupul lui de simetrie magnetică include grupul de simetrie al unui vector polar, ∞m , și grupul $1'$, acesta fiind grupul limită $\infty m1'$. Aceeași simetrie ca vectorul E o are și raza vectoare r .

Intensitatea câmpului magnetic, H. Acesta este un vector axial, care, la inversia timpului își inversează sensul. Și reflexia pe un plan paralel cu axa principală inversează, de asemenea, sensul unui vector axial. Desigur, compunerea unei asemenea

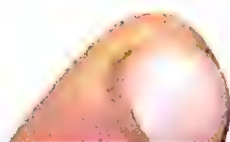
oglindiri cu inversia timpului nu va modifica sensul vectorului \mathbf{H} , fiind, deci, un element de simetrie pentru acest vector. Din această cauză, grupul de simetrie al vectorului intensitate a cîmpului magnetic conține ca subgrup grupul de simetrie al vectorului axial ∞/m precum și grupul m' (acest plan fiind paralel cu axa ∞). Un asemenea grup limită este ∞/mm' .

Ca exercițiu, să determinăm care ar fi simetria *sarcinii magnetice*, dacă o asemenea sarcină ar putea, în general, exista. Aceasta ar fi un pseudoscalar, care și-ar schimba semnul la inversia timpului. Desigur, față de inversia spațio-temporală (antiinversia) mărimea aceasta trebuie să fie invariantă. Din această cauză, simetria ei este $\infty\infty 1'$.

Grupurile punctuale ale simetriei magnetice a cristalelor, considerate ca grupuri de antisimetrie, pot fi folosite pentru definierea simetriei (mai exact a antisimetriei) tensorilor de material de tip impar (v. § 44). Folosirea lor se bazează pe următoarele considerații. Aplicarea inversiei tensorilor de tip impar are ca efect înmulțirea tuturor componentelor lor cu -1 , această operație fiind normal să fie considerată drept o antiidentificare: $\bar{I} \rightarrow I'$. Operația aceasta ca atare lipsește, evident, din grupurile de antisimetrie ale tensorilor de tip impar, însă produsele sale cu operațiile care intră în grupul de simetrie al tensorului definesc simetria acestuia.

Fie, de exemplu, ca printre elementele de simetrie ale unui tensor de tip impar să intre planul de simetrie m . Deoarece $m = 2 \cdot \bar{I}$, iar $\bar{I} \rightarrow I'$, atunci $m \rightarrow 2 \cdot I' = 2'$, adică din faptul că printre elementele de simetrie ale unui tensor de tip impar există un plan de simetrie, rezultă că el va avea și o axă de antisimetrie de ordinul doi, perpendiculară pe acest plan. Aceasta înseamnă că în cazul rotației unui tensor (sau a sistemului de coordonate) cu 180° în jurul direcției perpendiculare la planul de simetrie, toate componentele lui își modifică semnul. Și într-adevăr, una dintre proiecțiile stereografice ale suprafeței efectului piezoelectric longitudinal în cristalul de turmalină (clasa $3m$), reprezentate în figura 44.2, este astfel construită, încît planul proiecției X_2X_3 coincide cu unul dintre planurile de simetrie ale cristalului. Axa perpendiculară la acest plan, X_1 , trebuie deci să fie antiaxă de ordinul doi: $2' \parallel X_1$, iar faptul că este într-adevăr așa se vede foarte clar din proiecție.

Un alt exemplu: fie ca un tensor de tip impar să aibă axa de simetrie de ordinul doi, 2. Deoarece $2 = m \cdot \bar{I}$, rezultă $2 \rightarrow m'$, adică din existența în cazul unui tensor de tip impar a unei axe de simetrie de ordinul doi rezultă existența la el și a unui plan de antisimetrie perpendicular pe axă. Aceasta se vede din figurile 58.2 și 58.3, în care sînt date proiecțiile stereografice ale supra-



fețelor efectului piezoelectric longitudinal din cristalele de etilen-diamintartrat și sulfat de litiu (clasa 2). Axa $2 \parallel X_2$ nu se observă în aceste figuri (ea permite să ne mărginim numai la un singur cerc anterior al proiecțiilor), pe cînd planul de antisimetrie, $m' \perp \perp X_2$, perpendicular la acea axă, nu se vede foarte clar.

Deoarece într-un grup de antisimetrie împreună cu un plan de simetrie intră și o antiaxă de ordinul doi, perpendiculară pe plan, iar împreună cu o axă de ordinul doi, un antiplan perpendicular la axă, în grupul de antisimetrie trebuie să intre și produsul acestor elemente — anticentrul de simetrie (sau centrul de antisimetrie), \bar{I}' . El intră în grupul de antisimetrie al oricărui tensor de tip impar: într-adevăr, dacă un tensor se înmulțește cu -1 , atît în cazul inversiei \bar{I} cît și al antiidentificării, I' , el va fi invariant față de produsul acestor două operații, \bar{I}' . Prin urmare, în timp ce tensorii de tip par au centru de simetrie, tensorii de tip impar au un centru de antisimetrie.

Acest fapt facilitează aflarea grupurilor de antisimetrie, $G'(T)$, ale tensorilor de tip impar, T : pentru a construi grupul $G'(T)$ este suficient să se adauge grupului de simetrie $G(T)$ un centru de antisimetrie, \bar{I}' , și produsele grupului cu toți $g \in G(T)$. Evident, toate grupurile $G'(T)$, obținute în acest fel, sînt alb-negre.

Grupurile limită de antisimetrie se construiesc analog. Astfel, grupul de simetrie al vectorului $G(V)$ este $G(V) = \infty m$; grupul său de antisimetrie, $G'(V) = \infty/m'm$, se vede clar în figura 22.3, în care este reprezentată suprafața sa. Grupul de simetrie al unui tensor de rangul trei, e , antisimetric în raport cu toți indicii, (v. § 42) este $G(e) = \infty\infty$, iar grupul lui de antisimetrie este $G'(e) = \infty\infty m'$.

În tabelul 68.2 sînt date grupurile de antisimetrie G' pentru orice tensor de tip impar, al cărui grup de simetrie este G .

Tabelul 68.2

Grupurile de antisimetrie ale tensorilor de tip impar (G — grupul de simetrie, G' — grupul de antisimetrie)

G	G'	G	G'	G	G'
1	$\bar{1}'$	$\bar{4}$	$4'/m'$	23	$m'3$
2	$2/m'$	422	$4'/m'm'm'$	432	$m'3m'$
m	$2'/m$	$4mm$	$4/m'mm$	$\bar{4}3m$	$m'3m$
222	$m'm'm'$	$\bar{4}2m$	$4/m'm'm$	∞	∞/m'
$mm2$	$mm'm'$	6	$6/m'$	$\infty 2$	$\infty/m'm'$
3	$\bar{3}'$	$\bar{6}$	$6'/m$	∞m	$\infty/m'm$
32	$\bar{3}'m'$	622	$6/m'm'm'$	$\infty\infty$	$\infty\infty m'$
$3m$	$\bar{3}'m$	$6mm$	$6/m'mm$		
4	$4/m'$	$\bar{6}m2$	$6'/mmm'$		

§ 69. GRUPURILE SPAȚIALE ALE SIMETRIEI MAGNETICE — GRUPURILE ȘUBNIKOV

Grupurile spațiale ale simetriei magnetice, denumite, în cinstea lui Șubnikov, întemeietorul teoriei antisimetriei, *grupuri Șubnikov*, sînt subgrupuri discrete ale grupului euclidian extins. Grupurile Șubnikov nu sînt, prin urmare, decît o generalizare naturală a grupurilor Fiodorov, care reprezintă subgrupuri discrete ale grupului euclidian obișnuit.

Din grupurile Șubnikov fac parte, în primul rînd, toate acele transformări care intră în grupurile spațiale obișnuite : translațiile, rotațiile cu inversie și rotațiile elicoidale obișnuite, cu unghiuri de $\pi/2$, $\pi/3$ și multipli ai acestor valori, oglindirile și inversiile cu alunecare ; în al doilea rînd fac parte aceleași transformări, însoțite de inversia timpului : antitranslațiile, antirotațiile de inversie și elicoidale obișnuite, antireflexiile și antiinversiile cu oglindire și cu alunecare.

Exact cum fiecărui grup spațial îi corespunde un grup punctual și numai unul, care definește clasa cristalelor ce posedă grupul spațial dat, tot așa și fiecărui grup Șubnikov îi corespunde un singur grup punctual cristalografic al simetriei magnetice, și numai unul, care determină clasa simetriei magnetice a tuturor cristalelor ce au grupul Șubnikov dat. În transformările care intră în compunerea unui grup Șubnikov, înlocuind toate translațiile prin identificări, iar antitranslațiile prin antiidentificări, obținem grupul punctual al simetriei magnetice, care corespunde grupului Șubnikov considerat.

Fiecărei clase a simetriei magnetice îi corespunde, în general, cîteva grupuri Șubnikov ; în timp ce există ceva mai mult de o sută de clase ale simetriei magnetice, numărul grupurilor Șubnikov depășește o mie cinci sute.

Dintre grupurile Șubnikov fac parte mai întîi 230 grupuri spațiale (Fiodorov) obișnuite. Dacă acestea sînt interpretate drept grupuri Șubnikov, ele vor apărea ca operații care nu conțin nici un fel de antioperații, adică ca *grupuri albe* sau *polare* ; le vom nota cu simbolul Φ . Întrucît în compunerea acestor grupuri nu există nici un fel de antioperații, ele nu pot face parte nici din efectivul grupurilor punctuale ale simetriei magnetice, care corespund acestor grupuri Șubnikov. Așadar, celor 230 grupuri Șubnikov albe sau polare, Φ , le corespund 32 grupuri punctuale, albe, G .

Dintre grupurile Șubnikov fac parte apoi cele 230 grupuri în compunerea cărora, alături de fiecare operație intră și antioperația care-i corespunde : pe lîngă translații — antitranslațiile, pe lîngă rotații — antirotațiile de același gen și cu aceleași unghiuri etc. ; vom numi aceste grupuri *grupuri cenușii* sau *neutre* și le vom nota

cu $\Phi 1'$. Fiecăruia dintre grupurile Șubnikov neutre îi corespunde, evident, un anumit grup punctual neutru al simetriei magnetice, iar tuturor celor 230 grupuri Șubnikov neutre, $\Phi 1'$, le corespund 32 grupuri punctuale neutre ale simetriei magnetice, $G1'$.

În fine, pe lângă cele 460 grupuri Șubnikov enumerate, care se deduc de fapt fără nici o demonstrație, mai există și grupurile Șubnikov Φ' , de *polaritate mixtă*, sau *alb-negre*. În compunerea fiecăruia dintre ele, inversia timpului, ca atare, nu intră, însă intră obligatoriu unele antioperații. Aceste grupuri au fost deduse de Zamorzaev (1953, 1967) și, independent de el, de Belov, Neronova și Smirnova (1955, 1957). S-au găsit 1191 grupuri de acest fel.

În grupurile de acest tip operațiile nu corespund niciodată unor antioperații : dacă într-un grup Φ' intră rotația cu un anumit unghi sau translația cu un anumit vector, atunci nici antirotația cu același unghi, nici antitranslația cu același vector nu pot face parte din grupul Φ' . Operațiile obișnuite formează subgrupul Fiodorov, F , de indice 2 al grupului Șubnikov considerat, Φ' . Dacă toate antioperațiile din grupul Φ' sînt înlocuite cu operațiile obișnuite corespunzătoare, obținem grupul Fiodorov, Φ ; în raport cu el, F este un subgrup de indice 2. Din această cauză, metoda deducerii grupurilor spațiale alb-negre ale simetriei magnetice se deosebește, în principiu, de deducerea grupurilor punctuale alb-negre : trebuie examinate succesiv toate grupurile de indice 2 ale grupurilor Fiodorov, Φ . Păstrînd operațiile care aparțin subgrupului F , fără modificări, înlocuim celelalte operații ale grupului Φ cu antioperațiile corespunzătoare. Ansamblul operațiilor și antioperațiilor obținute astfel în final constituie grupul Șubnikov, Φ' ; în acest mod se deduc toate grupurile Șubnikov de polaritate mixtă.

Grupurile Șubnikov de polaritate mixtă se împart în două tipuri, dat fiind că subgrupurile de indice 2, din grupurile Fiodorov Φ pot fi, în general, tot de două tipuri. Fie G un grup punctual care corespunde grupului spațial Φ . Grupului spațial F îi pot corespunde fie (a) un grup punctual H , care în raport cu grupul punctual G este un subgrup de indice 2, fie (b) același grup punctual G , care corespunde și grupului spațial Φ (aceeași subîmpărțire a grupului F de indice 2 în două tipuri se poate defini și altfel : subgrupul F al grupului Φ este de tipul (a) dacă subgrupul său al tranzițiilor coincide cu subgrupul translațiilor grupului Φ , sau de tipul (b), în caz contrar ; v. Boyle și Lawrenson, 1972).

Dacă subgrupul F este de tipul (a), atunci el are de două ori mai puține elemente de rotație, în schimb, toate translațiile care intră în grupul Φ intră și în subgrupul său, F . Dacă subgrupul F este de tipul (b), atunci în componentele lui intră aceleași elemente de rotație ca și în grupul Φ , însă în grupul F translațiile sînt, într-o

primă aproximație, cam de două ori mai puține decît în grupul Φ ; aceasta înseamnă că volumul celulei elementare este în grupul F de două ori mai mare decît în grupul Φ .

Să trecem acum de la grupurile Fiodorov Φ (de comparat simbolul din doi termeni, Φ/F , introdus de Koptik (1966) pentru grupul Șubnikov, Φ'), la grupurile Șubnikov alb-negre, Φ' , corespunzătoare celor dintîi. Dacă subgrupul Fiodorov, F , al unui grup Șubnikov dat este de tipul (a), atunci grupului spațial alb-negru Φ' îi corespunde grupul punctual alb-negru, G' . Într-adevăr, dacă grupul punctual G corespunde grupului Fiodorov, Φ , iar subgrupul lui, H , subgrupului Fiodorov, F , este clar că grupului Șubnikov, Φ' , îi corespunde grupul punctual alb-negru, G' , pentru care H reprezintă un subgrup cristalografic.

Dacă subgrupul Fiodorov, F , al grupului Φ' este de tipul (b), atunci grupului Șubnikov alb-negru, Φ' , îi corespunde grupul punctual cenușiu $G1'$. Într-adevăr, în acest caz subgrupul Fiodorov F al grupului Φ' nu conține toate translațiile care intră în grupul Φ' , ceea ce înseamnă că grupul Șubnikov Φ' conține antitranslația. Prin trecerea de la un grup spațial la grupul punctual care îi corespunde, toate translațiile sînt înlocuite cu identificarea, iar antitranslațiile cu antiidentificarea; antiidentificarea este conținută numai în grupurile cenușii. Din această cauză, dacă unui grup Fiodorov, Φ , și subgrupului său F de indice 2 îi corespunde

Tabelul 69.1

Numărul de grupuri Șubnikov de diferite tipuri

Grupurile Șubnikov	Grupurile punctuale corespunzătoare			Total
	32 albe (G)	32 cenușii ($G1'$)	58 alb-negre (G')	
Albe (Φ)	230	—	—	230
Cenușii ($\Phi1'$)	—	230	—	230
Alb-negre (Φ')	—	517	674	1191
Total	230	747	674	1651

unul și același grup punctual G , atunci grupului Șubnikov Φ' îi corespunde grupul punctual $G1'$. În tabelul 69.1 este dat numărul de grupuri Șubnikov de diferite tipuri.

Pentru notarea grupurilor Șubnikov, în practică se utilizează sistemul modificat al notațiilor internaționale al grupurilor spațiale, propus de Belov, Neronov și Smirnov (v. articolul lor din 1955; scrierea tuturor grupurilor Șubnikov este dată și în mono-

grafia lui V. A. Koptik, 1966) ; sistemul lui A. M. Zamorzaev, după cît se pare, nu s-a răspîndit. Notățiile internaționale ale grupurilor Șubnikov se definesc cu ajutorul unor reguli care nu se deosebesc cu nimic de regulile analoage pentru grupurile punctuale ale simetriei magnetice. Singura completare este necesară pentru notarea acelor grupuri Șubnikov alb-negre, care corespund grupurilor punctuale cenușii. În notațiile acestor grupuri, simbolului rețelei Bravais i se atașează un indice care să arate direcția antitranslației.

Litera mică din notarea indicelui arată că antitranslația este îndreptată după muchia corespunzătoare a celulei elementare, majusculele A , B sau C , că este orientată spre centrul feței respective, iar majuscula I , că este orientată spre centrul celulei elementare.

Din notația internațională a unui grup Șubnikov este ușor de determinat tipul lui și grupul lui punctual de simetrie magnetică. Dacă notația grupului Șubnikov coincide cu notația unui grup Fiodorov oarecare (adică nu conține nici semnul „prim” nici alt indice în simbolul rețelei), atunci grupul este unul dintre grupurile Șubnikov albe (polare). Dacă în simbolul grupului apare $1'$ sau $3'$, atunci grupul este un grup Șubnikov cenușiu (neutru). Dacă în simbolul grupului intră alte elemente de simetrie cu semnul prim, înseamnă că avem de-a face cu unul dintre grupurile Șubnikov alb-negre, care fac parte din clasa de simetrie magnetică alb-neagră. În fine, indicele atașat literei care desemnează tipul celulei Bravais permite includerea grupului considerat în unul dintre grupurile Șubnikov alb-negre, care intră în clasa de simetrie magnetică cenușie (neutră).

Să examinăm un exemplu de deducere a grupurilor Șubnikov : să enumerăm toate grupurile Șubnikov, care pot fi deduse din grupul Fiodorov $P2$. Mai jos este extras setul de elemente ale grupului $\Phi = P2$ (strict vorbind, ele ar trebui notate $[h|t]$, h fiind rotația, iar t translația, însă aici, operațiile de tipul $[h|0]$ și $[1|t]$ se notează, pentru prescurtare, h și, respectiv, t), care conțin toate elementele generatoare ale subgrupului F de indice 2. În continuare este dată lista elementelor generatoare ale subgrupului F . Sub fiecare dintre aceste subgrupuri este scris grupul Șubnikov corespunzător, Φ' (cu ajutorul simbolului lui Koptik, format din doi termeni, el se notează cu Φ/F). Antitranslațiile sînt notate cu vectori ce au indicele prim.

$$P2 = \{1, 2_y, a_1, a_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a_1 + a_2, \dots\}$$

$$P1 = \{1, a_1, a_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a_1 + a_2, \dots\}$$

$$P2' = \{1, 2'_y, a_1, a_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a_1 + a_2, \dots\}$$

$$P2 = \{1, 2_y, a_2, a_3, 2a_1, 2a_2, \dots\}$$

$$P_a2 = \{1, 2_y, a'_1, a_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a'_1 + a'_2, \dots\}$$

$$P2 = \{1, 2_y, a_1, a_3, 2a_1, 2a_2, \dots\}$$

$$P_b2 = \{1, 2_y, a_1, a'_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a'_1 + a'_2, \dots\}$$

$$C2 = \{1, 2_y, a_3, 2a_1, 2a_2, a_1 + a_2, \dots\}$$

$$P_c2 = \{1, 2_y, a'_1, a'_2, a_3, 2a_1, 2a_2, a_1 + a_2, \dots\}$$

Absența din acest tablou a grupului P_c2 se explică prin faptul că el se deosebește de P_a2 numai ca notație.

Grupurile punctuale și rețelele Bravais, obținute din grupurile Șubnikov, sînt următoarele :

Grupul Șubnikov	$P2'$	P_a2	P_b2	P_c2
Grupul punctual	$2'$	$21'$	$21'$	$21'$
Rețeaua Bravais	$P2/m$	P_a2/m	P_b2/m	P_c2/m

Prima dintre ele este de tipul (a), iar celelalte trei de tipul (b).

§ 70. SIMETRIA MAGNETICĂ A CRISTALELOR

Structura electrică și cea magnetică (v. Vonsovski, 1981) ale unui cristal pot fi descrise, după Landau și Lifșiț (1957, § 28), cu ajutorul a două funcții de coordonate : o funcție scalară $\rho(\mathbf{r})$, care descrie densitatea reală (microscopică) a sarcinii electrice, mediată în timp (însă nu și în raport cu volumul elementar) și o funcție vectorială, $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, care descrie densitatea microscopică de curent, supusă aceleiași medieri. Prima dintre ele definește structura electrică a cristalului, iar cea de a doua, structura lui magnetică : dacă densitatea de sarcină, ρ , sau de curent, \mathbf{j} , nu sînt identic egale cu zero, se spune că cristalul are o structură electrică, respectiv, magnetică. În realitate, toate cristalele au structură electrică, pe cînd structură magnetică au relativ puține cristale.

Funcțiile $\rho(\mathbf{r})$ și $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ trebuie să satisfacă anumite condiții. De exemplu, este evident că va fi satisfăcută condiția de neutralitate a fiecărei celule elementare în parte și, deci, și a cristalului ca un întreg

$$\int_V \rho dV = 0 \quad (70.1)$$

(aici și în continuare integrala se extinde asupra celulei elementare ; toate rezultatele sînt valabile și pentru orice volum elementar pe care îl imaginăm compus din multe celule elementare întregi). Într-un cristal care se află în stare de echilibru, nu trebuie să existe nici curentul microscopic, adică

$$\int_V \mathbf{j} \, dV = 0. \quad (70.2)$$

Momentul magnetic raportat la unitatea de volum,

$$\mathbf{m} = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{r} \times \mathbf{j} \, dV, \quad (70.3)$$

poate totuși fi diferit de zero și atunci cristalul se numește cristal *feromagnetic*. Dacă însă densitatea curentului microscopic, \mathbf{j} , nu este identic egală cu zero și totuși $\mathbf{m} = 0$, atunci cristalul este *antiferomagnetic*. În acest din urmă caz, celula elementară poate fi împărțită în porțiuni ale căror momente magnetice să fie diferite de zero și numai prin însumare să se anuleze.

Grupul G de simetrie microscopică al unui cristal este intersecția (subgrupul comun cel mai mare) grupurilor de simetrie ale structurii electrice și ale celei magnetice ale cristalului

$$G = G(\rho) \cap G(\mathbf{j}). \quad (70.4)$$

Grupul de simetrie al densității de sarcină electrică, $G(\rho)$ este pur și simplu grupul Fiodorov, sau grupul spațial Φ , al cristalului, completat cu inversia timpului, dat fiind că densitatea de sarcină electrică este invariantă față de inversia timpului : $G(\rho) = \Phi 1'$. Grupul de simetrie al densității de curent, $G(\mathbf{j})$ conține inversia timpului, $1'$, numai în cazul în care $\mathbf{j}(\mathbf{r}) \equiv 0$, deoarece inversia timpului inversează sensul curentului. Dacă însă cristalul prezintă structură magnetică ($\mathbf{j}(\mathbf{r}) \neq 0$), atunci $G(\mathbf{j})$ este unul dintre grupurile Șubnikov albe sau alb-negre. De același tip este, în acest caz, și grupul simetriei microscopice a cristalului, G .

Cristalele care nu au structură magnetică fac parte din unul dintre cele 230 de grupuri spațiale cenușii ale simetriei magnetice, $\Phi 1'$. Lor le corespund grupuri spațiale cenușii, $G 1'$. Așadar, grupurile punctuale ale simetriei magnetice a tuturor cristalelor care nu au structură magnetică sînt cenușii. Reciproca nu este

însă adevărată : un cristal cu un grup punctual cenușiu poate avea un grup spațial alb-negru ; în acest caz, cristalul are structură magnetică.

Trebuie să remarcăm că în cristalofizica magnetică grupul de simetrie al unui cristal nemagnetic obișnuit nu se notează ca în fizica clasică a cristalelor. Astfel, cristalele de sare gemă, care nu au structură magnetică, au simetria clasică $m\bar{3}m$, cele de cuarț — 32, cele de dihidrofosfat de potasiu — $\bar{4}2m$. În cristalofizica magnetică grupurile punctuale de simetrie ale acestor cristale vor fi însă : $m\bar{3}m1' = m\bar{3}'m$, $321' = 3'2$ și, respectiv, $\bar{4}2m1'$. Dacă am nota însă simetria lor și în cristalofizica magnetică cu $m\bar{3}m$, 32 și $\bar{4}2m$ am comite o eroare flagrantă : din aceste notații ar fi rezultat că aceste cristale au o structură magnetică.

Cristalele feromagnetice au, așa cum s-a remarcat, un moment magnetic, m , diferit de zero. Vectorul moment magnetic, m , este axial și își modifică direcția la inversia timpului. Rezultă deci că grupul lui de simetrie magnetică este ∞/mm' . Grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor feromagnetice sînt subgrupuri ale următoarelor grupuri

$$1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, m, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6},$$

$$2/m, 4/m, 6/m, 2', 22'2', 32', 42'2',$$

$$62'2', m', m'm'2, mm'2', 3m', 4m'm',$$

$$6m'm', \bar{3}m', \bar{4}2'm', \bar{6}m'2', 2'/m',$$

$$mm'm', 4/mm'm', 6/mm'm'.$$

În această listă sînt 31 de grupuri de simetrie magnetică. Dintre ele 13 sînt albe, 18 sînt alb-negre, neexistînd grupuri cenușii (v., de asemenea, Tavgher, 1958, și Șuvalov, 1959).

Celelalte 59 de grupuri punctuale albe și alb-negre ale simetriei magnetice este firesc să fie denumite grupuri punctuale antiferomagnetice. Cristalele cu grupuri punctuale antiferomagnetice se numesc cristale *antiferomagnetice de tipul I*. Totodată există și cristale *antiferomagnetice de tipul II* ; acestea sînt cristale cu grupuri punctuale cenușii, dar fără grupuri spațiale alb-negre ; ele se deosebesc substanțial din punct de vedere al proprietăților fizice de antiferomagneticele de tipul I (v. § 73).

În tabelul 70.1 este dată clasificarea cristalelor care nu au structură magnetică, în feromagnetice și antiferomagnetice de tipul I și de tipul II, în raport cu grupurile de simetrie magnetică. Din el rezultă, printre altele, că deosebirile dintre grupurile cenușii, pe de o parte, și grupurile albe și alb-negre, pe de alta, sînt

Clasificarea cristalelor care au proprietăți magnetice diferite, în funcție de simetria magnetică

Grupurile spațiale	Grupurile punctuale		
	90 de grupuri punctuale albe și alb-negre		32 de grupuri punctuale cenușii
	31 de grupuri feromagnetice	59 de grupuri antiferomagnetice	
1421 de grupuri albe și alb-negre	Feromagnetice (275 de grupuri Șubnikov)	Antiferomagnetice de tipul I (629 de grupuri Șubnikov)	Antiferomagnetice de tipul II (517 grupuri Șubnikov)
230 de grupuri cenușii		—	Cristale lipsite de structură magnetică (230 de grupuri Șubnikov)

esențiale din punct de vedere fizic. Diferența dintre grupurile albe și cele alb-negre, cu toate că este foarte importantă la deducerea acestor grupuri, nu are nici un sens fizic, după cum se vede (v. însă și § 76).

Simetria magnetică a unui cristal se stabilește cu ajutorul neutronografiei — a studiului difracției neutronilor lenți pe structura cristalină dată (v. Iziumov și Ozerov, 1966): difracția neutronilor pe nuclee este determinată de grupul $G(\rho)$, iar difracția neutronilor pe momentele magnetice ale electronilor este determinată de grupul $G(j)$. Această metodă permite și punerea în evidență a distribuției spațiale a momentelor magnetice ordonate într-un cristal. Grupul Fiodorov al unui cristal se determină, de obicei, cu ajutorul studiului röntgenografic, complet insensibil la distribuția momentelor magnetice. Este important de lămurit care este raportul dintre grupurile spațiale deduse prin metode diferite.

Întrucât analiza röntgenografică nu este capabilă să deosebească antitranslația de translația obișnuită și antirotația de rotația obișnuită, ar părea evident că grupul Fiodorov al unui cristal cu structura magnetică, stabilită röntgenografic, se obține din grupul său Șubnikov, dacă înlocuim în acesta din urmă toate antitranslațiile prin translații obișnuite și toate antirotațiile prin rotații obișnuite. Am ajunge, deci, probabil la același grup Fiodorov din care este dedus grupul Șubnikov dat (v. § 69).

În practică însă rezolvarea acestei probleme se complică uneori foarte tare; vinovată de aceasta este interacțiunea mag-

netică relativ slabă. Să examinăm un exemplu concret. Tranziția feromagnetică în cristalele de fier (α — Fe) are loc la 1043 K; mai sus de această temperatură cristalele sînt paramagnetice, mai jos de ea sînt feromagnetice. Grupul Șubnikov al fazei paramagnetice este $Im\bar{3}'m$, iar al celei feromagnetice $I4/m\bar{m}'m'$. Analiza röntgenostructurală a unui cristal monodomenial ar trebui să ducă, conform celor spuse mai sus, la grupul Fiodorov $I4/mmm$. Însă o celulă cristalografică a unei faze feromagnetice, chiar dacă este, strict vorbind, o prismă tetragonală regulată, practic nu se deosebește de un cub: raportul dintre axe este $c/a = 1 + 3 \cdot 10^{-5}$. Din această cauză, datele röntgenostructurale conduc la grupul $G(\rho) = Im\bar{3}'m$. Distribuția momentelor magnetice dintr-o celulă cristalografică a unui cristal feromagnetic de fier este reprezentată în figura 70.1, grupul $G(j) = I4/m\bar{m}'m'$; la fel este și $G = G(\rho) \cap G(j)$. Grupul punctual al acestui cristal este $4/m\bar{m}'m'$.

În figura 70.2 este reprezentată distribuția momentelor magnetice într-un cristal de fluorură de mangan, MnF_2 . O asemenea configurație a momentelor magnetice se caracterizează prin grupul Șubnikov, $G(j) = P_1 4mnc$; pe urmă, din datele analizei röntgenografice, $G(\rho) = P4_1/mnm1'$. Intersecția acestor grupuri este grupul Șubnikov al fluorurii de mangan antiferomagnetice,

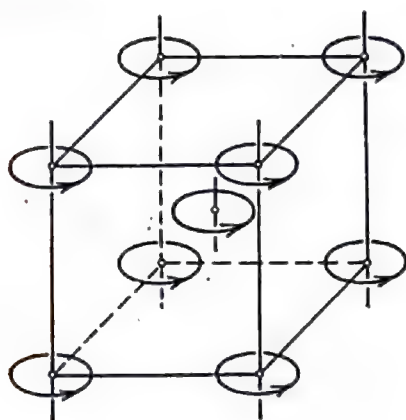


Fig. 70.1. Distribuția momentelor magnetice într-un cristal feromagnetic de fier.

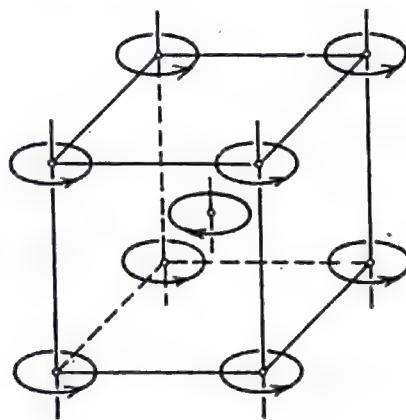


Fig. 70.2. Distribuția momentelor magnetice într-un cristal feromagnetic de fluorură de mangan.

$P4_2'/mnm'$; grupul punctual al simetriei magnetice a acestui cristal este respectiv $4'/m\bar{m}m'$. Proprietățile lui fizice confirmă această concluzie (v. § 73).

Pe lângă antiferomagnetici uniaxi se întîlnesc și feromagnetici multiaxi; astfel, grupul Șubnikov al granatului de disproziu și aluminiu, $Dy_3Al_5O_{12}$ este $Ia\bar{3}d'$, grupul punctual al simetriei magnetice fiind $m\bar{3}m'$.

Simetria antiferomagneticilor de tipul I, așa cum s-a remarcat, nu se caracterizează numai prin grupurile spațiale și punctuale alb-negre, ci și prin cele albe ale simetriei magnetice. De exemplu, un cristal antiferomagnetic de calcopirită, CuFeS_2 , se caracterizează prin grupul Șubnikov $I42d$ (și respectiv prin clasa de simetrie magnetică $\bar{4}2m$).

Drept exemplu de antiferomagnetic de tipul II se poate lua ilmenitul, FeTiO_2 ; grupul său Șubnikov este R_3 , alb-negru, pe când clasa de simetrie magnetică este grupul $\bar{3}1'$, cenușiu.

Cu ajutorul difracției neutronilor au fost descoperite și structuri magnetice în care cu toate că aranjarea momentelor magnetice este ordonată, ea nu corespunde nici uneia dintre cele 1421 de grupuri Șubnikov albe și alb-negre, așa-numitele structuri elicoidale. Sînt cunoscute patru tipuri de astfel de structuri: spirala simplă, SS , spirala conică sau spirala feromagnetică, FS , spirala compusă, CS , și, în fine, unda de spin longitudinală statică, LSW ; ele sînt date în figura 70.3. Spirala simplă (SS) a fost descoperită, în particular, în holmiu și în disproziu; spirala feromagnetică (FS) în holmiu și erbiu; spirala compusă (CS) și unda de spin longitudinală (LSW) tot în erbiu: în diferite intervale de temperatură se realizează diferite tipuri de ordonare magnetică. În timp ce simetria structurii electrice, $G(\rho)$, în cazul acestor

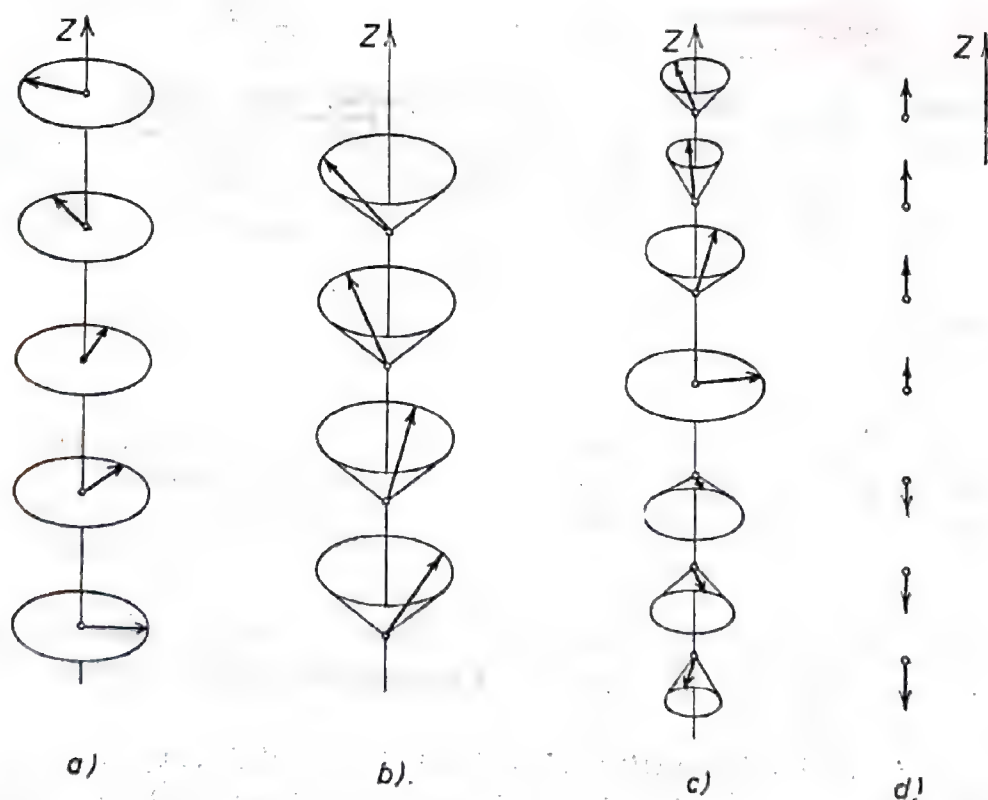


Fig. 70.3. Structuri elicoidale: a) spirală simplă; b) spirală feromagnetică; c) spirală compusă; d) undă de spin longitudinală statică.

cristale reprezintă pur și simplu unul dintre grupurile Fiodorov (pentru multe dintre acestea el este grupul $P6_3/mmc$), la care se adaugă inversia timpului, grupul de simetrie al structurii lor magnetice, $G(j)$ este cu totul ieșit din comun. În planurile perpendiculare pe axa elicei grupul $G(j)$ conține aceleași translații ca și $G(\rho)$. Însă acea translație a grupului $G(\rho)$ care este orientată după axa elicei se combină în grupul $G(j)$ cu o rotație (SS , FS și CS) sau cu schimbarea valorii momentului magnetic (LSW). Unghiul de rotație, legat de translația elementară, nu este pur și simplu o parte a unei rotații complete, ci depinde și de temperatură. Prin urmare, momentele magnetice ale atomilor în structurile elicoidale nu formează o rețea, cu toate că atomii respectivi constituie o rețea. Aceasta este, de asemenea, una dintre urmările interacțiunilor magnetice relativ slabe. Grupurile de simetrie care descriu asemenea structuri au fost deduse de Naiș (1963), iar mecanismul apariției lor a fost studiat de către Dzealoșinski (1964, 1964, a) de pe poziția teoriei tranzițiilor de fază de speța a doua, Landau.

71. REALIZAREA GEOMETRICĂ A UNUI GRUP ORTOGONAL EXTINS

Vectorii axiali sînt invariante la inversie, ceea ce înseamnă că și baza vectorială axială, construită din ei, are această proprietate (v. § 23). În virtutea acestui fapt, tuturor transformărilor ortogonale ale unei baze vectoriale axiale îi corespund matricele ortogonale $\|\hat{c}_{i'k}\|$, avînd determinantul pozitiv, $\det \|\hat{c}_{i'k}\| = 1$. Matricele ortogonale al căror determinant este negativ nu corespund nici unui fel de transformări ortogonale.

Vom defini efectul aplicării operației de inversie a timpului, I' , asupra vectorilor axiali astfel: inversia timpului, I' , schimbă în sens contrar circulația tuturor vectorilor axiali. Acestei transformări îi va corespunde matricea $\hat{c}_{i'k}(I') = -\delta_{i'k}$. Datorită invarianței vectorilor axiali față de inversie, același efect are asupra tuturor vectorilor axiali și inversia spațio-temporală (antiinversia), \bar{I}' , ei corespunzîndu-i exact aceeași matrice, $c_{i'k}(\bar{I}') = -\delta_{i'k}$. În general, tuturor operațiilor care conțin inversia timpului — adică antioperațiilor — le corespund matrice ortogonale $\|\hat{c}_{i'k}\|$ cu determinantul $\det \|\hat{c}_{i'k}\| = -1$.

Definiția introdusă are un sens fizic evident: vectorii axiali definiți în acest fel coincid din punct de vedere al proprietăților lor de transformare cu vectorul intensitate a cîmpului magnetic, H , aceștia fiind, de asemenea, vectori axiali care-și schimbă semnul la inversia timpului. Atunci este firesc ca proprietățile de transformare ale vectorului intensitate a cîmpului electric,

E , care nu își modifică direcția la inversia timpului, să fie atribuite vectorilor polari. Baza vectorială polară construită din vectorii polari este, de asemenea, invariantă față de inversia timpului. Din această cauză, pentru orice antirotații — simple sau de inversie — o bază vectorială polară se va transforma cu ajutorul aceleiași matrice ortogonale, $\|c_{i'k}\|$, ca și în cazul rotațiilor corespunzătoare.

În felul acesta, este definită legea de transformare a vectorilor bazei polare (e_i) și axiale (\hat{e}_i) sub acțiunea oricărei operații g , care face parte dintr-un grup ortogonal extins, $\infty\infty\bar{1}1'$

$$e_{i'} = c_{i'k}(g)e_k, \quad (71.1)$$

$$\hat{e}_{i'} = \hat{c}_{i'k}(g)\hat{e}_k.$$

În acest caz, fiecărei operații $g \in \infty\infty\bar{1}1'$ îi corespund două matrice egale sau care se deosebesc numai ca semn, $\|c_{i'k}(g)\|$ și $\|\hat{c}_{i'k}(g)\|$. În grupul ortogonal extins intră operații de patru tipuri: rotații proprii, R , rotații cu inversie, $\bar{I}R$, antirotații, $I'R$, și antirotații de inversie, $\bar{I}'R$. Dacă unei rotații proprii, R , îi corespunde matricea $\|r_{i'k}\|$, atunci matricele $\|c_{i'k}(g)\|$ și $\|\hat{c}_{i'k}(g)\|$ se definesc pentru orice operații ale grupului ortogonal extins cu ajutorul următorului tablou

g	R	$\bar{I}R$	$I'R$	$\bar{I}'R$
$c_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$
$\hat{c}_{i'k}$	$r_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$	$-r_{i'k}$

Reunind baza polară cu baza vectorială, astfel încît să coincidă direcțiile vectorilor cu același indice, e_1 cu \hat{e}_1 , e_2 cu \hat{e}_2 , e_3 cu \hat{e}_3 , obținem o bază combinată. Matricea $\|c_{i'k}\|$ acționează asupra părții sale polare, iar $\|\hat{c}_{i'k}\|$ asupra părții axiale. Operațiile R o rotesc ca pe un întreg, încît este suficient să se studieze acțiunea inversiei asupra ei.

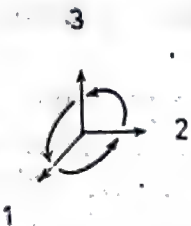
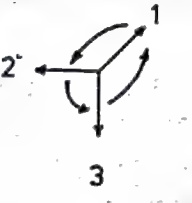
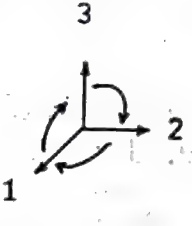
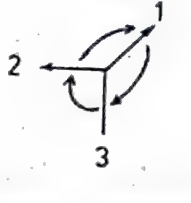
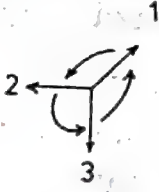
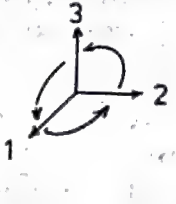
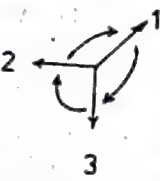
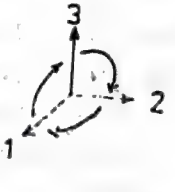
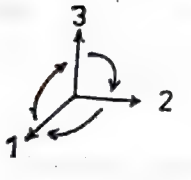
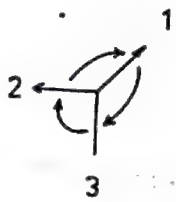
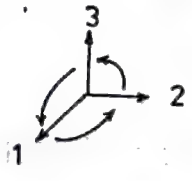
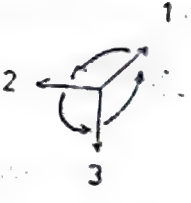
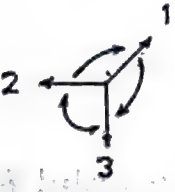
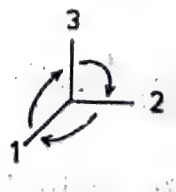
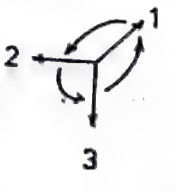
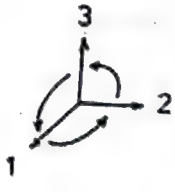
Inversia spațială răstoarnă vectorii bazei polare, lăsîndu-i pe cei ai bazei axiale neschimbați. Ca urmare, tripletul polar dextrogir se transformă într-un triplet levogir, iar cel levogir, în unul dextrogir. Pe lîngă aceasta, denumirea șurubului, format prin compunerea unui vector polar cu unul axial, se modifică și ea în denumirea inversă. Din această cauză, baza combinată care

a fost acordată (neacordată) pînă la inversie rămîne la fel și după ea (de comparat cu § 23).

Inversia timpului, I' , dimpotrivă modifică sensul vectorilor bazei axiale în sens invers, nemodificînd sensul vectorilor polari.

Tabelul 71.1

Aceiași bază su pusă la

Baza vectorială combinată, inițială	Aceiași bază su pusă la		
	inversia spațială	inversia temporală	inversia spațio-temporală
 <p>dextrogir acordat</p>	 <p>levogir acordat</p>	 <p>dextrogir neacordat</p>	 <p>levogir neacordat</p>
 <p>levogir acordat</p>	 <p>dextrogir acordat</p>	 <p>levogir neacordat</p>	 <p>dextrogir neacordat</p>
 <p>dextrogir neacordat</p>	 <p>levogir neacordat</p>	 <p>dextrogir acordat</p>	 <p>levogir acordat</p>
 <p>levogir neacordat</p>	 <p>dextrogir neacordat</p>	 <p>levogir acordat</p>	 <p>dextrogir acordat</p>

În acest caz, cei trei vectori polari își conservă denumirea, însă șuruburile formate prin combinarea unui vector polar cu unul axial își modifică denumirea în denumirea inversă; așadar, baza acordată se transformă în bază neacordată, iar baza neacordată, în bază acordată.

În sfârșit, inversia spațio-temporală, I' , transformă în vectorii inverși atât sensul vectorilor polari, cât și sensul de rotație al vectorilor axiali. Din această cauză, cei trei vectori polari dextrogiri se transformă în vectori levogiri, iar cei trei vectori levogiri, în dextrogiri, însă denumirea elicei formată din compunerea unor vectori polari cu unii axiali nu se modifică. Ca urmare, baza acordată se transformă în bază neacordată, iar baza neacordată, în bază acordată.

În tabelul 71.1 este dată acțiunea inversiei asupra bazelor vectoriale combinate. Bazele se numesc în tabel dextrogiră sau levogiră după cum vectorii bazei polare formează un triplet dextrogir sau levogir. În bazele dextrogire acordate cei doi vectori polar și axial combinați (suprapuși) formează un șurub drept, iar în bazele levogire acordate un șurub stâng. Dimpotrivă, în bazele neacordate denumirea sensului șurubului este inversă denumirii bazei. Criteriul formal al acordării bazei este următorul: rotirea în jurul primului vector al bazei se efectuează dinspre vârful pozitiv al celui de al doilea vector spre vârful pozitiv al celui de al treilea; sensul de rotație în jurul celorlalți vectori ai bazei se deduce de aici prin intermediul permutărilor ciclice. În cazul bazelor neacordate, sensul de rotire este invers.

Tabelul 71.1 arată că operații diferite, aplicate unei baze date o vor transforma în baze diferite. Prin urmare, cunoscând bazele combinate „veche” și „nouă”, se poate afla complet univoc, prin intermediul cărei transformări anume a doua bază a fost obținută din prima.

§ 72. TENSORII DEFINIȚI PE GRUPUL ORTOGONAL EXTINS

Toți tensorii definiți pe grupul rotațiilor se transformă la fel, și anume,

$$A_{i'_1 \dots i'_n} = r_{i'_1 k_1} \dots r_{i'_n k_n} A_{k_1 \dots k_n}. \quad (72.1)$$

Aici $\|r_{i'k}\|$ este matricea rotației $R(\hat{k}, \varphi)$ în jurul vectorului \hat{k} cu unghiul φ . Însă tensorii definiți pe un grup ortogonal se împart în două tipuri. Tensorii de tip par se transformă în cadrul rotației

cu inversie, $\bar{I}R(\vec{k}, \varphi)$ a sistemului de coordonate după formula (72.1) pe cînd tensorii de tip impar, după formula

$$A_{i'_1 \dots i'_n} = -r_{i'_1 k_1} \dots r_{i'_n k_n} A_{k_1 \dots k_n}. \quad (72.2)$$

Tabelul 72.1

Tabelul de înmulțire a grupurilor de inversie spațio-temporală, $\bar{I}1'$

	1	$\bar{1}$	1'	$\bar{1}'$
1	1	$\bar{1}$	1'	$\bar{1}'$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}'$	1'
1'	1'	$\bar{1}'$	1	$\bar{1}$
$\bar{1}'$	$\bar{1}'$	1'	$\bar{1}$	1

Subliniem că $\|r_{i'k}\|$ este matricea care corespunde rotației proprii corespunzătoare, $R(\vec{k}, \varphi)$, nu a întregii transformări ortogonale.

În grupul ortogonal extins intră transformări de patru tipuri: rotațiile proprii, $R(\vec{k}, \varphi)$, și cele trei genuri de rotații improprii și anume, rotațiile cu inversie, $\bar{I}R(\vec{k}, \varphi)$, antirotațiile, $I'R(\vec{k}, \varphi)$ și antirotațiile cu inversie, $\bar{I}'R(\vec{k}, \varphi)$. Rezultatul aplicării consecutive a două rotații improprii se obține ușor folosind tabelul de înmulțire a grupului in-

versiilor spațio-temporale (tab. 72.1).

Se poate arăta destul de ușor că pe un grup ortogonal extins se pot defini tensori de patru tipuri, dintre care unul par și trei impari. Tensorii de tip par sînt invarianți la grupul inversiilor $\bar{I}1'$ și deci la orice transformare $JR(\vec{k}, \varphi)$, unde $J \in \bar{I}1'$, se vor transforma după formula (72.1). În cazul rotațiilor proprii, după aceeași formulă se transformă tensorii de orice tip.

Orice tensor de oricare dintre tipurile impare, sub acțiunea rotațiilor improprii de două genuri, se transformă după formula (72.2), iar sub acțiunea unei rotații de genul al treilea, după formula (72.1). Într-adevăr, fie ca tensorul considerat, sub acțiunea rotațiilor de inversie, să se transforme după formula (72.2). Sub acțiunea antirotațiilor el se va transforma fie după formula (72.1), fie după formula (72.2). Deoarece antirotația de inversie poate fi considerată ca produsul dintre o rotație de inversie și o antirotație, este clar că în primul caz tensorul dat, sub acțiunea antirotațiilor cu inversie, se transformă după formula (72.2), iar în al doilea caz, după formula (72.1).

Luînd în considerație toate posibilitățile, ajungem la concluzia că pe un grup ortogonal extins se pot defini exact trei tipuri de tensori impari. Denumirea tipurilor (electric, magnetic, magnetoelectric) se datorește faptului că acestor tipuri le revin vectorii intensitate a cîmpului electric, intensitate a cîmpului magnetic și tensorul polarizării magnetoelectrice (v. § 73).

Toți tensorii definiți pe un grup ortogonal extins se transformă după formula

$$A_{i'_1 \dots i'_n} = \gamma_{i'_1 k_1} \dots \gamma_{i'_n k_n} A_{k_1 \dots k_n}, \quad (72.3)$$

în care coeficientul $\psi = \pm 1$ depinde de tipul tensorului și de genul de transformare și se determină din tabelul 72.2, iar $\|r_{i'k}\|$ este matricea rotației proprii corespunzătoare.

Tabelul 72.2

Coeficienții γ din formula de transformare a unui tensor definit pe un grup ortogonal extins

Tipul de tensor	Genul de transformare			
	R	$\bar{1}R$	$1'R$	$\bar{1}'R$
Par	1	1	1	1
Electric	1	-1	1	-1
Magnetic	1	1	-1	-1
Magnetoelectric	1	-1	-1	1

Simetria exterioară a tensorilor definiți pe un grup ortogonal extins este determinată de grupul punctual maxim al simetriei magnetice la care este invariant tensorul dat. În tabelul 72.3 sînt

Tabelul 72.3

Simetria magnetică a scalarilor și a vectorilor definiți pe un grup ortogonal extins

Tipul de tensor	Scalar	Vector
Par	$\infty\infty m1'$	$\infty/mm1'$
Electric	$\infty\infty 1'$	$\infty/m1'$
Magnetic	$\infty\infty m$	∞/mm'
Magnetoelectric	$\infty\infty m'$	$\infty/m'm$

prezentate grupurile de simetrie magnetică ale scalarilor și vectorilor tuturor celor patru tipuri. Comparînd cu acest tablou rezultatele studiului simetriei mărimilor electrice și magnetice, efectuat la sfîrșitul paragrafului 68, vedem că intensitățile cîmpului electric și a cîmpului magnetic sînt într-adevăr reprezentate de vectori de tip electric și, respectiv, de tip magnetic. Însă sarcina electrică

este exprimată printr-un scalar de tip par (nu electric!). Sarcina magnetică, dacă ar exista, ar fi descrisă de un scalar de tip magnetoelectric.

Să examinăm simetria exterioară a tensorilor fiecărui tip în parte.

Tensorii de tip par, în cazul oricăror rotații improprii, se transformă exact la fel ca în cazul transformărilor proprii corespunzătoare acestora. De aceea, tensorii de material de tip par pentru toate clasele de simetrie magnetică, care fac parte din același sistem, sînt la fel. În general, tensorii de material de tip par sînt diferiți de zero pentru cristalele tuturor claselor de simetrie magnetică. Dimpotrivă, tensorii de material de oricare dintre cele trei tipuri impare, pentru multe clase de simetrie magnetică, sînt identic egali cu zero.

Tensorii de tip electric se transformă, pentru orice antirotații, la fel ca pentru rotațiile proprii corespunzătoare, iar pentru orice antirotații de inversie, ca pentru rotațiile de inversie corespunzătoare. Din această cauză, este foarte ușor de dedus forma tensorului de tip electric, invariant față de un grup punctual de simetrie magnetică dată : este suficient să se renunțe la toate semnele prim în notația grupului și să se deducă printr-un procedeu obișnuit (metoda verificării directe sau pur și simplu cu ajutorul unor tabele), forma tensorului corespunzător de tip impar, invariant față de grupul punctual obișnuit, care se obține. Prin urmare, problema simetriei magnetice a tensorilor de tip electric se reduce doar la problema simetriei obișnuite a tensorilor de tip impar.

Este clar că forma unui tensor de tip par, care să fie invariant față de grupul de simetrie magnetică dat, se determină exact la fel : din notarea grupului se renunță la toate semnele prim și se caută tensorul de tip par, invariant față de grupul obișnuit, care se obține.

Tensorul de tip magnetic, după cum arată tabelul 72.2, se transformă, în cazul unei antirotații $I'R(\hat{k}, \varphi)$, ca un tensor de tip electric sub acțiunea rotației cu inversie, corespunzătoare, $\bar{I}R(\hat{k}, \varphi)$. Antirotațiile cu inversie, $\bar{I}'R(\hat{k}, \varphi)$, acționează diferit asupra tensorilor de ambele tipuri. Rezultă deci următoarea regulă : un tensor de tip magnetic, invariant față de grupul magnetic, G , are exact aceeași formă ca și tensorul de tip electric, invariant față de grupul magnetic, G_1 . Pentru a obține grupul G_1 din G , este necesar să se înlocuiască în G toate rotațiile de inversie cu antirotațiile corespunzătoare, iar antirotațiile cu rotațiile de inversie.

Analog se deduce o a doua regulă : *tensorul de tip magnetoelectric*, invariant față de grupul magnetic, G , are exact aceeași

Tabelul 72.4

Correspondența dintre grupurile de simetrie magnetică ale tensorilor de diferite tipuri

G	G_1	G_2	G	G_1	G_2
$\infty\infty m1'$ $\infty\infty m$ $\infty\infty m'$	$\infty\infty m1'$ $\infty\infty 1'$ $\infty\infty m'$	$\infty\infty m1'$ $\infty\infty m$ $\infty\infty 1'$	$\infty/m1'$ ∞/m ∞/m'	$\infty/m1'$ $\infty 1'$ ∞/m'	$\infty/m1'$ ∞/m $\infty 1'$
$\infty\infty 1'$ $\infty\infty$	$\infty\infty m$ $\infty\infty$	$\infty\infty m'$ $\infty\infty$	$\infty 1'$ ∞	∞/m ∞	∞/m' ∞
$m3'm$ $m3m$ $m3m'$ $m'3m'$ $m'3m$	$m3'm$ $43'2$ $\overline{43}'m$ $m'3m'$ $m'3m$	$m3'm$ $m3m$ $m3m'$ $43'2$ $\overline{43}'m$	$6/mmm1'$ $6/mmm$ $6/m'mm$ $6/mm'm'$ $6/m'm'm'$ $6'/mmm'$ $6'/m'mm'$	$6/mmm1'$ $6221'$ $6/m'mm$ $6mm1'$ $6/m'm'm'$ $6'/mmm'$ $\overline{6}m21'$	$6/mmm1'$ $6/mmm$ $6mm1'$ $6/mm'm'$ $6221'$ $\overline{6}m21'$ $6'/m'mm'$
$\overline{43}'m$ $\overline{43}m$ $\overline{43}m'$	$m3m'$ $4'32'$ $4'3m'$	$m'3m$ $\overline{43}m$ $4'32'$	$\overline{6}m21'$ $\overline{6}m2$ $\overline{6}'m2'$ $\overline{6}m'2'$ $\overline{6}'m'2$	$6'/m'mm'$ $6'22'$ $6'm2$ $6'mm'$ $\overline{6}'2m'2$	$6'/mmm'$ $\overline{6}m2$ $6'mm'$ $\overline{6}m'2'$ $6'22'$
$43'2$ 432 $4'32$	$m3m$ 432 $\overline{43}m$	$m'3m'$ 432 $4'3m'$	$6mm1'$ $6mm$ $6m'm'$ $6'mm'$	$6/mm'm'$ $62'2'$ $6m'm'$ $\overline{6}m2'$	$6/m'mm$ $6mm$ $62'2'$ $\overline{6}'m2'$
$m3'$ $m3$ $m'3$	$m3'$ $23'$ $m'3$	$m3'$ $m3$ $23'$	$6221'$ 622 $62'2'$ $622'$	$6/mmm$ 622 $6mm$ $\overline{6}m2$	$6/m'm'm'$ 622 $6m'm'$ $\overline{6}'m'2$
$\infty/mm1'$ ∞/mm $\infty/m'm$ ∞/mm' $\infty/m'm'$	$\infty/mm1'$ $\infty 21'$ $\infty/m'm$ $\infty m1'$ $\infty/m'm'$	$\infty/mm1'$ ∞/mm $\infty m1'$ ∞/mm' $\infty 21'$	$6/m1'$ $6/m$ $6/m'$ $6'/m$ $6'/m'$	$6/m1'$ $61'$ $6/m'$ $6'/m$ $\overline{6}1'$	$6/m1'$ $6/m$ $61'$ $\overline{6}1'$ $6'/m'$
$\infty m1'$ ∞m $\infty m'$	∞/mm' $\infty 2'$ $\infty m'$	$\infty/m'm$ ∞m $\infty 2'$	$\overline{6}1'$ $\overline{6}$ $\overline{6}'$	$6'/m'$ $6'$ $\overline{6}'$	$6'/m$ $\overline{6}$ $6'$
$\infty 21'$ $\infty 2$ $\infty 2'$	∞/mm $\infty 2$ ∞m	$\infty/m'm'$ $\infty 2$ $\infty m'$	$61'$ $6'$ $\overline{6}'$	$6/m$ $\overline{6}$ $\overline{6}$	$6/m'$ $\overline{6}$ $\overline{6}'$

Tabelul 72.4 (continuare)

G	G ₁	G ₂	G	G ₁	G ₂
4/mmm1'	4/mmm1'	4/mmm1'	$\overline{3}1'$	$\overline{3}1'$	$\overline{3}1'$
4/mmm	4221'	4/mmm	$\overline{3}$	$\overline{3}$	$\overline{3}$
4/m'mm	4/m'mm	4mm1'	$\overline{3}'$	$\overline{3}'$	$\overline{3}'$
4/mm'm'	4mm1'	4/mm'm'			
4/m'm'm'	4/m'm'm'	4221'			
4'/mmm'	42m1'	4'/mmm'	3'	$\overline{3}$	3'
4'/m'mm'	4'/m'mm'	42m1'	3	3	3
$\overline{4}2m1'$	4'/mmm'	4'/m'mm'			
$\overline{4}2m$	4'22'	$\overline{4}2m$	mmm1'	mmm1'	mmm1'
$\overline{4}2'm'$	4'mm'	$\overline{4}2'm'$	mmm	2221'	mmm
4'2'm	4'2'm	4'mm'	mmm'	mmm'	mm21'
4'2m'	4'2m'	4'22'	mm'm	mm21'	mm'm'
			m'm'm'	m'm'm'	2221'
4mm1'	4/mm'm'	4/m'mm			
4mm	42'2'	4mm	mm21'	mm'm'	mmm'
4m'm'	4m'm'	42'2'	mm2	22'2'	mm2
4mm'	$\overline{4}2'm'$	4'2'm	m'm'2	m'm'2	22'2'
			mm'2'	mm'2'	mm'2'
4221'	4/mmm	4/m'm'm'			
422	422	422	2221'	mmm	m'm'm'
42'2'	4mm	4m'm'	222	222	222
4'22'	$\overline{4}2m$	4'2m'	22'2'	mm2	m'm'2
4/m1'	4/m1'	4/m1'			
4/m	41'	4/m	2/m1'	2/m1'	2/m1'
4/m'	4/m'	41'	2/m	21'	2/m
4'/m	$\overline{4}1'$	4'/m	2/m'	2/m'	21'
4'/m'	4'/m'	$\overline{4}1'$	2'/m	2'/m	m1'
			2'/m'	m1'	2'/m'
$\overline{4}1'$	4'/m	4'/m'			
$\overline{4}$	4'	$\overline{4}$	m1'	2'/m'	2'/m
4'	$\overline{4}'$	4'	m	2'	m
			m'	m'	2'
41'	4/m	4/m'			
4	4	4	21'	2/m	2/m'
4'	$\overline{4}$	$\overline{4}'$	2	2	2
			2'	m	m'
$\overline{3}m1'$	$\overline{3}m1'$	$\overline{3}m1'$			
$\overline{3}m$	3'2	$\overline{3}m$	$\overline{1}1'$	$\overline{1}1'$	$\overline{1}1'$
$\overline{3}m$	3'm	$\overline{3}m'$	$\overline{1}$	$\overline{1}'$	$\overline{1}$
$\overline{3}m'm$	$\overline{3}'m$	3'm	$\overline{1}'$	$\overline{1}$	$\overline{1}'$
3'm'	$\overline{3}'m'$	3'2			
			1'	$\overline{1}$	$\overline{1}'$
3'm	$\overline{3}m'$	$\overline{3}'m$	1	1	1
3m	32'	3m			
3m'	3m'	32'			
3'2	$\overline{3}m$	$\overline{3}'m'$			
32	32	32			
32'	3m	3m'			

formă ca tensorul de tip electric, invariant față de grupul magnetic, G_2 . Pentru a obține grupul G_2 din G trebuie ca în G să se înlocuiască antirotațiile cu antirotațiile de inversie corespunzătoare, iar antirotațiile de inversie cu antirotațiile simple.

Grupurile G_1 și G_2 , pentru oricare grup dat al simetriei magnetice, se pot deduce ușor cu ajutorul tabelului 72.4, iar problema formei tensorului de tip electric, invariant față de un grup de simetrie magnetică dat, a fost tratată mai sus. Rezultă deci că problemele formale ale cristalofizicii magnetice pot fi astfel reduse la problemele deja rezolvate ale fizicii clasice a cristalelor (Sirotnin, 1962; Birss, 1962).

§ 73. EFECTUL PIEZOMAGNETIC ȘI EFECTUL MAGNETOELECTRIC

Dacă între forțele termodinamice generalizate, X_B (v. § 57), includem cele trei componente ale vectorului intensitate a cîmpului magnetic, H_k , iar printre coordonatele generalizate, x_k , se includ cele trei componente ale vectorului inducție magnetică, împărțite la 4π ,

$$\tilde{B}_i = \frac{1}{4\pi} B_i,$$

atunci ordinul matricei termodinamice se mărește la 13. Dependența coordonatelor termodinamice generalizate de forțele termodinamice generalizate, în aproximația liniară, capătă atunci forma (de comparat cu relația (57.18))

$$\Sigma = (C_p/T)\Theta + p_k E_k + q_k H_k + \alpha_\mu \sigma_\mu, \quad (73.1, a)$$

$$\tilde{D}_i = p_i \Theta + (1/4\pi) \varkappa_{ik} E_k + (1/4\pi) \nu_{ik} H_k + d_{i\mu} \sigma_\mu, \quad (73.1, b)$$

$$\tilde{B}_i = q_i \Theta + (1/4\pi) \nu_{ki} E_k + (1/4\pi) \mu_{ik} H_k + b_{i\mu} \sigma_\mu, \quad (73.1, c)$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta + d_{k\lambda} E_k + b_{k\lambda} H_k + s_{\lambda\mu} \sigma_\mu. \quad (73.1, d)$$

În relațiile (73.1), pe lângă tensorii de material cunoscuți, există și unii noi, care descriu efecte încă nestudiate de noi. Esența acestor efecte poate fi ușor stabilită prin analogie cu efectele electrice corespunzătoare. Astfel, coeficienții q_i caracterizează, evident, *efectul piromagnetic*, și efectul invers acestuia, *efectul magnetocaloric liniar*, reprezentînd, în ansamblul lor, vectorul coeficienților piromagnetici, q . Coeficienții $b_{i\mu}$ descriu *efectul piezomag-*

netic direct și *efectul piezomagnetic invers*; în total ei compun un tensor de rangul trei, simetric în raport cu doi indici — tensorul coeficienților piezomagnetici, b . În fine, coeficienții μ_{ik} formează un tensor simetric de rangul doi — tensorul permeabilității magnetice, μ .

Nu există un analog al coeficienților ν_{ik} . Ei exprimă *efectul magnetoelectric direct* și *efectul magnetoelectric invers*: cristalele pentru care acești coeficienți sînt diferiți de zero, fiind introduse în cîmp magnetic se polarizează (efectul direct), iar introduse în cîmp electric se magnetizează (efectul invers). Acești coeficienți formează în ansamblu un tensor nesimetric de rangul doi, v — tensorul coeficienților magnetoelectricei.

Să transcriem din formulele (73.1) termenii care conțin noii tensori de material și să notăm tipul mărimii tensoriale care li se atribuie. Obținem

$$\Sigma = q \cdot H + \dots \quad (\text{par}) = q \cdot (\text{magnetic}),$$

$$\tilde{D} = v \cdot H + \dots \quad (\text{electric}) = v \cdot (\text{magnetic}),$$

$$\tilde{B} = E \cdot v + \dots \quad (\text{magnetic}) = (\text{electric}) \cdot v,$$

$$\tilde{B} = \mu \cdot H + \dots \quad (\text{magnetic}) = \mu \cdot (\text{magnetic}),$$

$$\tilde{B} = b : \sigma + \dots \quad (\text{magnetic}) = b : (\text{par})$$

$$\varepsilon = H \cdot b + \dots \quad (\text{par}) = (\text{magnetic}) \cdot b.$$

De aici reiese clar tipul fiecăruia dintre tensorii de material care ne interesează: q — de tip magnetic, b — de tip magnetic, μ — de tip par, v — de tip magnetoelectric.

Forma fiecăruia dintre acești tensori, pentru oricare dintre clasele de simetrie magnetică, se poate deduce destul de ușor folosind metodele expuse în paragraful 72. Aici vom menționa doar în care dintre clase sînt posibile efectele descrise de acești tensori.

Efectul piromagnetic este exprimat prin vectorul de material q , care este de tip magnetic. Evident, acest vector nu este identic nul numai în acele cristale ale căror grupuri de simetrie magnetică sînt subgrupuri ale grupului de simetrie a vectorului de tip magnetic, ∞/mm' . Acestea sînt grupurile punctuale, deja cunoscute, ale feromagneticeilor; toate aceste grupuri au fost enumerate în paragraful 70.

Efectul piezomagnetic este exprimat de tensorul b . Acesta este un tensor de rangul trei, de tip magnetic, simetric în raport cu ultimii doi indici. Ca toți tensorii de tip magnetic, el devine zero în cristalele ale căror grupuri de simetrie conțin inversia timpului sau antiinversia, însă nu numai în ele. De fapt, tensorul coeficienților piezomagnetici este analog cu tensorul coeficienților piezoelectricei. Acesta din urmă, după cum știm din fizica clasică (nemagnetică) a cristalelor, devine zero nu numai în cristalele care au centru de simetrie, ci și în cristalele din clasa 432. De aici rezultă deci (v. tab. 72.4) că el devine zero în cristalele claselor magnetice $43'2$, $4'32'$ și 432. Înlocuind în aceste clase, cu ajutorul aceluiași tabel, antirotațiile prin rotațiile cu inversie, obținem clasele nemagnetice $m3m$, $\bar{4}3m$ și 432, în care, evident, tensorul coeficienților piezomagnetici este egal cu zero.

Efectul magnetoelectric este exprimat prin tensorul de rangul doi, v , de tip magnetoelectric, care, în general, este nesimetric. Ca toți tensorii de tip magnetoelectric, el este egal cu zero în cristalele ale căror grupuri de simetrie magnetică conțin inversia timpului sau inversia obișnuită (spațială). Tensorul coeficienților magnetoelectricei este analog cu tensorul (nesimetric) activității optice totale. După cum se știe, tensorul activității optice totale (v. tabelele 47.1 și E.9) este egal cu zero nu numai în cristalele care au un centru de simetrie, ci și în cristalele din clasele $\bar{4}3m$, $\bar{6}m2$ și $\bar{6}$; prin urmare, în cristalele din clasele magnetice $\bar{4}3'm$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}'3m'$, $\bar{6}m21'$, $\bar{6}m2$, $\bar{6}'m2'$, $\bar{6}m'2'$, $\bar{6}'m'2$, $\bar{6}1'$, $\bar{6}$ și $\bar{6}'$. Înlocuind în aceste clase toate antirotațiile cu antirotațiile cu inversie corespunzătoare, iar rotațiile cu inversie, cu antirotațiile simple, obținem clasele magnetice $m3m'$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}'32$, $6'/mmm'$, $\bar{6}m2$, $6'mm'$, $\bar{6}m'2'$, $6'22'$, $6'/m$, $\bar{6}$ și $6'$; în cristalele din clasele enumerate efectul magnetoelectric nu este posibil.

Folosindu-ne de aceeași analogie, este ușor de arătat că în cristalele din clasele magnetice $m'3m'$, 432, $\bar{4}'3m'$, $m'3$ și 23 tensorul coeficienților magnetoelectricei este izotrop. Rezultă deci că pentru orice direcție a câmpului magnetic, un cristal din aceste clase supus câmpului se va polariza după aceeași direcție. Și invers, un cristal de acest fel fiind introdus într-un câmp electric orientat oricum se magnetizează în aceeași direcție.

Din această analogie se poate deduce, de asemenea, că și pentru texturile din clasele magnetice $\infty/m'm$, ∞m , $\infty 2'$ și, respectiv, cristalele din clasele magnetice $6/m'mm$, $6mm$, $62'2'$, $4/m'mm$, $4mm$, $42'2'$, $3m$, $32'$ precum și $\bar{6}'m2'$, $\bar{4}'2'm$ și $\bar{3}'m$ tensorul coeficienților magnetoelectricei este antisimetric. Aceste cristale introduse în câmp magnetic (sau electric) se polarizează (sau se magnetizează) după o direcție perpendiculară pe câmp. Cel mai

comod este ca câmpul să fie orientat perpendicular pe axa principală de simetrie a cristalului; polarizarea (magnetizarea) este, de asemenea, perpendiculară pe această axă.

Tensorii efectului piezomagnetic și ai efectului magnetoelectric își schimbă semnul la operația de inversie a timpului și, prin urmare, sînt identici egali cu zero în toate cristalele care nu au structură magnetică. Pînă la introducerea în fizică a noțiunii de simetrie magnetică se considera că efectul piezomagnetic se deosebește ca simetrie de efectul piezoelectric, numai pentru că vectorii care definesc câmpul magnetic sînt axiali, în timp ce vectorii care exprimă câmpul electric sînt polari. S-a presupus, din această cauză, că simetria internă a tensorului coeficienților piezomagnetici este $\epsilon V[V^2]$; de aici a fost calculată forma generală a acestui tensor pentru toate clasele cristalografice (v. tab. E.14). Întrucît pentru toate clasele în afară de trei ($m3m$, 432 și $\bar{4}3m$), acest tensor este diferit de zero, au fost întreprinse nenumărate încercări de a descoperi un efect piezomagnetic la cristalele care nu au structură magnetică; toate încercările nu au avut, firește, nici un succes. Abia după ce Dzealoșinski (1957, 1959) a demonstrat că atât efectul piezomagnetic cît și efectul magnetoelectric sînt posibile numai în cristalele care au o structură magnetică și a enumerat cîteva dintre cristalele a căror simetrie magnetică permite aceste efecte, Borovik-Romanov (1959, 1960) a descoperit efectul piezomagnetic în cristalele de CoF_2 și MnF_2 , iar Astrov (1960) efectul magnetoelectric în cristalele de Cr_2O_3 .

Faptul că cristalul are o structură magnetică este o condiție necesară dar nu și suficientă pentru apariția în acest cristal a efectelor descrise de tensorii de tip magnetic sau de tip magnetoelectric. Dacă un cristal are structură magnetică, atunci se poate afirma că grupul lui spațial nu conține inversia timpului (nu este „cenușiu”). Pentru a nu deveni zero tensorii de material de tipul magnetic și de tipul magnetoelectric, este necesar ca grupul punctual al simetriei magnetice a cristalului să nu conțină inversia timpului (să nu fie cenușiu). Aceasta este o condiție considerabil mai restrictivă; ea nu este satisfăcută de cristalele denumite în paragraful 70 antiferomagnetici de tipul II (acestea sînt cristalele în ale căror grupuri Șubnikov intră antitranslațiile). Așadar, efectele determinate de tensorii de tip magnetic și de tip magnetoelectric nu sînt posibile nu numai în cristalele care nu au structură magnetică, ci nici în antiferomagneticii de tipul II.

Asupra problemelor tratate în acest capitol, vezi K. P. Belov (1959); K. P. Belov, Beleanikova, Levitin și Nikitin (1965); Vonsovski (1981); Iziumov și Ozerov (1966); Koptik (1966, 1967); Landau și Lifșiț (1957); Turov (1963); Șubnikov (1951); Șubnikov și Koptik (1972); Birss (1964); Bhagavantam (1966).

§ 74. STUDIUL TERMODINAMIC AL EFECTELOR NELINIARE

Pentru ca în cadrul termodinamicii cristalelor (v. §§ 57, 60, 61, 63) să abordăm efectele neliniare, trebuie să se ia în considerare termenii de gradul trei în dezvoltările potențialelor termodinamice. Astfel, pentru un potențial termodinamic Φ și procese izotermice ($\Theta = 0$) trebuie ca în loc de (60.8) să se folosească dezvoltarea

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_a \partial X_b} \right)_0 X_a X_b + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial X_a \partial X_b \partial X_c} \right)_0 X_a X_b X_c$$

$$(a, b, c = 1, \dots, 9),$$

unde X_a sînt componentele vectorului intensitate a cîmpului electric, \mathbf{E} , și ale tensorului tensiunilor, σ . Ținînd seama de relațiile (57.13), (57.14) și (57.17) și utilizînd pentru derivatele de ordinul trei ale potențialului termodinamic notațiile

$$R_{ijk} = - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial E_i \partial E_j \partial E_k} \right)_0, \quad P_{ij\lambda} = - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial E_i \partial E_j \partial \sigma_\lambda} \right)_0,$$

$$(74.1)$$

$$Q_{i\lambda\mu} = - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial E_i \partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu} \right)_0, \quad L_{\lambda\mu\nu} = - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu \partial \sigma_\nu} \right)_0,$$

vom scrie această dezvoltare sub forma

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_{ij} E_i E_j - d_{i\lambda} E_i \sigma_\lambda - \frac{1}{2} s_{\lambda\mu} \sigma_\lambda \sigma_\mu - \frac{1}{3} R_{ijk} E_i E_j E_k -$$

$$(74.2)$$

$$- P_{ij\lambda} E_i E_j \sigma_\lambda - Q_{i\lambda\mu} E_i \sigma_\lambda \sigma_\mu - \frac{1}{3} L_{\lambda\mu\nu} \sigma_\lambda \sigma_\mu \sigma_\nu.$$

De aici, cu ajutorul relației (57.7), vom obține pentru vectorul inducție electrică, \mathbf{D} , și pentru tensorul micilor deformări, ϵ , relațiile generalizate (57.18)

$$\tilde{D}_i = \tilde{\chi}_{ij} E_j + d_{i\lambda} \sigma_\lambda + \tilde{R}_{ijk} E_j E_k + 2P_{ij\lambda} E_j \sigma_\lambda + Q_{i\lambda\mu} \sigma_\lambda \sigma_\mu, \quad (74.3, a)$$

$$\epsilon_{\lambda} = d_{i\lambda} E_i + s_{\lambda\mu} \sigma_\mu + P_{ij\lambda} E_i E_j + 2Q_{i\lambda\mu} E_i \sigma_\mu + L_{\lambda\mu\nu} \sigma_\mu \sigma_\nu; \quad (74.3, b)$$

ca și în capitolul 7, tilda înseamnă împărțirea la 4π .

În locul coeficienților $P_{ij\lambda}$, $Q_{i\lambda\mu}$, $L_{\lambda\mu\nu}$ în relațiile pentru $\tilde{\mathbf{D}}$ și ϵ se pot folosi componentele tensorilor de material corespunzători

$$\tilde{D}_i = \tilde{\chi}_{ij} E_j + d_{ijk} \sigma_{jk} + \tilde{R}_{ijk} E_j E_k + 2P_{ijkl} E_j \sigma_{kl} + Q_{ijklm} \sigma_{jk} \sigma_{lm}, \quad (74.4, a)$$

$$\epsilon_{ij} = d_{kij} E_k + s_{ijkl} \sigma_{kl} + P_{kijl} E_k E_l + 2Q_{kijlm} E_k \sigma_{lm} + L_{ijklmn} \sigma_{kl} \sigma_{mn}. \quad (74.4, b)$$

Simetria internă și denumirile acestor tensori sînt următoarele :

$\mathbf{R} \sim [V^3]$ — tensorul coeficienților pătratici ai permitivității dielectrice;

$\mathbf{P} \sim [V^2]^2$ — tensorul coeficienților de electrostricțiune;

$\mathbf{Q} \sim V [[V^2]^2]$ — tensorul coeficienților piezoelectricei pătratici;

$\mathbf{L} \sim [[V^2]^3]$ — tensorul coeficienților pătratici ai deformabilității elastice*.

Regulile de calcul care leagă componentele acestor tensori de coeficienții $P_{ij\lambda}$, $Q_{i\lambda\mu}$ și $L_{\lambda\mu\nu}$ sînt demonstrate în anexa F. Simetria exterioară a acestor tensori, ca a oricărui tensor de material, nu este inferioară simetriei cristalului; forma lor generală pentru diferite clase este dată în anexa E (v. și § 48).

Tensorii \mathbf{P} și \mathbf{L} sînt de tip par; ei sînt diferiți de zero pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor. Coeficienții pătratici ai deformabilității elastice exprimă micile corecții la legea lui Hooke. Coeficienții de electrostricțiune descriu însă micile corecții ale efectului piezoelectric invers, din cristalele piezoelectrice, pe cînd în cristalele din clasele nepiezoelectrice precum și în toate corpurile izotrope, toată deformarea provocată de acțiunea cîmpului electric se reduce la electrostricțiune.

* În literatură se pot întîlni diferite variante de definiții ale acestor tensori, în particular, cele ce nu cuprind coeficientul $1/2$ în formulele (74.1); se înțelege, în acest caz, coeficientul $1/2$ apare în relațiile (74.2)–(74.4). În felul acesta sînt definiți tensorii $g_{\lambda\mu\kappa}$ și $c_{\lambda\mu\nu}$ cu ajutorul formulelor (74.5)–(74.8).

Tensorii \mathbf{R} și \mathbf{Q} sînt de tip impar. Tensorii \mathbf{Q} sînt diferiți de zero pentru cristalele tuturor claselor fără centru de simetrie. În particular, la cristalele din clasa 432, în care efectul piezoelectric liniar obișnuit nu este posibil, ar putea să se observe un efect piezoelectric pătratic: însă polarizarea electrică sub acțiunea tensiunilor mecanice este proporțională nu cu componentele tensorului tensiunilor, ci cu unele produse de perechi de componente. Tensorii coeficienților pătratici ai permitivității dielectrice, \mathbf{R} , sînt diferiți de zero numai în cazul cristalelor a căror simetrie permite apariția efectului piezoelectric longitudinal; forma generală a unor asemenea tensori este dată în tabelul E. 10, iar clasele de simetrie ale acestui efect, în tabelul 58.3.

Faptul că influența tensiunilor mecanice asupra permitivității dielectrice, în formulele (74.3, a) și (74.4, a), este descrisă de aceeași coeficienți care în relațiile (74.3, b) și (74.4, b) descriu electrostricțiunea, este urmare a faptului că acești coeficienți sînt derivate de ordinul al treilea ale potențialului termodinamic (v. (74.1)). Din aceeași cauză, și coeficienții efectului piezoelectric pătratic exprimă, de asemenea, influența cîmpului electric asupra coeficienților deformabilității elastice.

Posibilitatea utilizării chiar și numai aproximative a considerentelor termodinamice pentru reducerea numărului de coeficienți trebuie avută în vedere în cazul analizei efectelor de ordin superior. De exemplu, propagarea undelor elastice într-un cristal supus unei tensiuni statice, σ^{st} , cu mult mai mare decît tensiunile legate de unda elastică, se determină cu ajutorul coeficienților de elasticitate

$$c_{\lambda\mu} = c_{\lambda\mu}^{(0)} + g_{\lambda\mu\kappa} \sigma_{\kappa}^{st}, \quad (74.5)$$

în care $c_{\lambda\mu}^{(0)}$ sînt coeficienții de elasticitate ai unui cristal netensionat (asupra propagării undelor elastice în aceste condiții și a altor probleme ale acusticii liniare a cristalelor, vezi Terston, 1966; Zarembo și Krasilnikov, 1970). Coeficienții $g_{\lambda\mu\kappa}$ sînt componentele tensorului de simetrie internă $[[V^2]^2][V^2]$, care, în general, are 126 de componente independente. Să analizăm acum energia elastică a unui cristal, cu o exactitate de pînă la puterea a treia a termenilor în deformații

$$W = \frac{1}{2} c_{\lambda\mu}^{(0)} \varepsilon_{\lambda} \varepsilon_{\mu} + \frac{1}{6} C_{\lambda\mu\nu} \varepsilon_{\lambda} \varepsilon_{\mu} \varepsilon_{\nu} \quad (74.6)$$

Evident, $C_{\lambda\mu\nu} = \partial^3 W / \partial \varepsilon_{\lambda} \partial \varepsilon_{\mu} \partial \varepsilon_{\nu}$ sînt componentele unui tensor de simetrie internă $[[V^2]^3]$, care are, în general, conform tabelului 47.1, a și 47.1, b, 56 de componente independente. Diferențiind

energia elastică, (74.6), de două ori în raport cu deformațiile, găsim

$$c_{\lambda\mu} = \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_\lambda \partial \varepsilon_\mu} = c_{\lambda\mu}^{(0)} + C_{\lambda\mu\nu} \varepsilon_\nu, \quad (74.7)$$

în care ε_ν poate fi, evident, considerată ca ε_ν^{st} . Cu gradul de exactitate luat aici,

$$\varepsilon_\nu^{st} = s_{\nu\kappa} \sigma_\kappa^{st}$$

în care $s_{\nu\kappa}$ este coeficientul deformabilității elastice și, deci

$$c_{\lambda\mu} = c_{\lambda\mu}^{(0)} + C_{\lambda\mu\nu} s_{\nu\kappa} \sigma_\kappa^{st}.$$

Comparînd ultima relație cu (74.5) obținem

$$g_{\lambda\mu\kappa} = C_{\lambda\mu\kappa} s_{\nu\kappa}. \quad (74.8)$$

Relația (74.8) nu contrazice faptul că simetria internă a tensorului g este egală cu $[[V^2]^2][V^2]$, însă reduce categoric numărul de componente independente ale acestui tensor: de la 126 la $56 + 21 = 77$, dintre ele caracterizînd proprietățile liniar elastice numai 56. La deducerea relației (74.8) nu s-a ținut seama de diferența dintre coeficienții izotermici și coeficienții adiabatici; luînd în considerație această diferență la definirea termenului principal, adică a lui $c_{\lambda\mu}^{(0)}$, se pare că ea poate fi neglijată în cadrul evaluării micilor corecții ale acestuia.

Forma tensorilor $C_{\lambda\mu\nu}$ și $g_{\lambda\mu\kappa}$, pentru unele clase, este dată în tabelele E.24 și E.25, iar valorile determinate experimental pentru $C_{\lambda\mu\nu}$ sînt cuprinse în tabelul 74.1. Se efectuează lucrări avînd ca scop și determinarea experimentală a celorlalți tensori de acest fel, cum ar fi tensorul efectului piezoelectric pătratic și tensorul de rangul cinci, care definește componenta deformației care depinde de cubul intensității cîmpului electric

$$\varepsilon_{ij}^{(3)} = \lambda_{ijklm} E_k E_l E_m.$$

Însă deocamdată s-au obținut numai unele componente ale acestor tensori — ale celui dintîi, pentru dihidrofosfatul de amoniu (Janik și Hruška, 1970) și pentru cuarț α (Hruška și Khogali, 1971), iar al celui de al doilea, pentru monocristalul de telur (Ehyshima și Ogawa, 1971) — care nu formează seturi complete de componente independente.

Tabelul 74.1

Coeficienții pătratelor ai elasticității (în 10^{12} dyn/cm²) pentru unele cristale din clasa $m3m$ și pentru cuarț (clasa 32)

Coeficienții $C_{\lambda\mu\nu}$ sînt legați de componentele tensorului C_{ijklmn} prin regula de calcul $C_{\lambda\mu\nu} = C_{ijklmn}$ ($\lambda, \mu, \nu = 1, \dots, 6$)

Cristalele	C_{111}	C_{112}	C_{123}	C_{456}	C_{144}	C_{55}
NaCl	- 8,43	-0,50	0,46	0,26	0,29	-0,60
KCl	- 7,26	-0,24	0,11	0,16	0,23	-0,26
LiF	-14,23	-2,64	1,56	0,94	0,85	-2,73
Ge	- 7,10	-3,89	-0,18	-0,53	-0,23	-2,92
Si	- 8,25	-4,51	-0,64	-0,64	0,12	-3,10
Cu	-12,71	-8,14	-0,50	-0,95	-0,03	-7,80
Ag	- 8,43	-5,29	1,89	0,83	0,56	-6,37
Au	-17,29	-9,22	-2,33	-0,12	-0,13	-6,48
MgO	-48,95	-0,95	-0,69	1,47	1,13	-6,59
Cuarț (SiO ₂)	- 2,10	-3,45	-2,94	C_{133} -3,12	-1,34	-2,0
	C_{113} 0,12	C_{114} -1,63	C_{124} -0,15		C_{134} +0,02	C_{222} -3,32
	C_{333} - 8,15	C_{344} -1,10	C_{444} -2,76			

§ 75. EFECTUL PIEZOREZISTIV

Efectul piezorezistiv (tensorezistiv) constă în variația rezistenței electrice a unui material, sub acțiunea tensiunilor mecanice (sau a deformațiilor). Efectul piezorezistiv se manifestă la numeroase substanțe, printre care și la metale, fiind însă cel mai intens la semiconductori, ceea ce tocmai permite utilizarea materialelor semiconductoare Ge, Si, GaSb, InSb, PbTe, Bi₂Te₃ pentru realizarea din ele a unor tensotraductoare sensibile, adică a unor aparate care transformă deformațiile mecanice (tensiunile) în mărimi electrice.

Efectul piezorezistiv poate fi definit drept variația tensorului rezistivității cristalului ρ_{ii} sub acțiunea tensiunilor σ_{mn}

$$E_i = (\rho_{ii}^0 + P_{ilmn} \sigma_{mn}) j_i; \quad (75.1)$$

aici E este intensitatea cîmpului electric, j — densitatea de curent, ρ_{ii}^0 — tensorul rezistivității cristalului în absența tensiunilor mecanice. Mai des însă, proprietățile piezorezistive ale unui cristal sînt caracterizate de tensorul coeficienților piezorezistivi, Π_{klmn} , care este legat de tensorul P_{ilmn} prin relația

$$P_{ilmn} = \rho_{ik}^0 \Pi_{klmn}; \quad (75.2)$$

în acest caz, ecuația efectului piezorezistiv capătă forma

$$E_j = \rho_{ik}^0 (\delta_{kl} + \Pi_{klmn} \sigma_{mn}) j_l. \quad (75.3)$$

Pentru cristalele din sistemul cubic, din care fac parte majoritatea cristalelor semiconductoare, utilizate ca tranzistori,

$$\rho_{ik}^0 = \rho^0 \delta_{ik}$$

iar

$$E_i = \rho^0 (\delta_{kl} + \Pi_{klmn} \sigma_{mn}) j_l. \quad (75.4)$$

Celălalt aspect al efectului piezorezistiv — dependența rezistivității cristalului de deformarea ε_{pq} — se exprimă prin ecuația

$$E_i = \rho_{ik}^0 (\delta_{kl} + m_{klpq} \varepsilon_{pq}) j_l; \quad (75.5)$$

tensorul coeficienților elastorezistivi, m , este legat de tensorul Π prin relațiile care rezultă din legea lui Hooke

$$m_{klpq} = \Pi_{klmn} c_{mnpq}, \quad \Pi_{klmn} = m_{klpq} s_{pqmn}, \quad (75.6)$$

în care c_{mnpq} sînt coeficienții de elasticitate, s_{pqmn} sînt coeficienții deformabilității elastice.

Simetria internă a tensorilor coeficienților piezorezistivi și elastorezistivi este $[V^2]^2$; în funcție de simetria în raport cu indicii tensorilor ρ_{kl} , σ_{mn} și ε_{pq} ei sînt simetrici în raport cu primii doi și cu următorii doi indici

$$\Pi_{\nu\mu} = \Pi_{lkmn} = \Pi_{klmn} = \Pi_{lknm}. \quad (75.7)$$

Acești tensori pot fi scriși și cu cîte doi indici: $\Pi_{\lambda\mu}$ s-a convenit să fie corelați cu Π_{klmn} prin relațiile

$$\Pi_{klmn} = \begin{cases} \Pi_{klmn} & (kl \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; \quad mn \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\Pi_{klmn} & (kl \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; \quad mn \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6) \end{cases}$$

(la fel fiind și relația care leagă pe $P_{\lambda\mu}$ cu P_{klmn}), iar $m_{\lambda\nu}$ cu m_{klpq} prin relația

$$m_{\lambda\nu} = m_{klpq} (kl \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; \quad pq \leftrightarrow \nu = 1, \dots, 6);$$

în acest caz relațiile (75.6) capătă forma

$$m_{\lambda\nu} = \Pi_{\lambda\mu} c_{\mu\nu}, \quad \Pi_{\lambda\mu} = m_{\lambda\nu} g_{\nu\mu}. \quad (75.8)$$

Pentru toate clasele cristalografice și clasele limită, forma generală a tensorilor care au această simetrie este dată în tabelul E.19, iar coeficienții $\Pi_{\lambda\mu}$, determinați experimental, în tabelul 75.1.

Tabelul 75.1

Coeficienții piezorezistivi ai unor cristale semiconductoare cubice (în 10^{11} N/m^2)

Cristalul	$\rho, \Omega \cdot \text{m}$	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}	Cristalul	$\rho, \Omega \cdot \text{m}$	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}
<i>n</i> -Ge	990	-4,7	-5,0	-137,9	<i>p</i> -PbTe	-	+35,0	+40,0	+185,0
<i>n</i> -Ge	150	-2,3	-3,2	-138,1	<i>n</i> -PbTe	-	+20,0	+25,0	-107,0
<i>p</i> -Ge	110	-3,7	+3,2	+96,7	<i>n</i> -PbS	-	+11,6	+6,6	-11,2
<i>n</i> -Si	1170	-102,2	+53,4	-13,6	<i>n</i> -InSb	-	+81,6	+114,2	+83,0
<i>p</i> -Si	780	+6,6	-1,1	+138,3	<i>p</i> -InSb	-	-70,0	-115,0	-10,0

În cadrul aplicațiilor practice ale efectului piezorezistiv, se măsoară diferența de potențial, U , după direcția vectorului unitar u și intensitatea curentului, I . Atunci densitatea de curent este

$$j = (I/S) q,$$

unde q este vectorul unitar al direcției curentului, iar S este suprafața secțiunii transversale a tensorezistorului. Deoarece

$$U = \alpha E \cdot u,$$

în care a este baza la capetele căreia s-a măsurat diferența de potențial, din ecuația (75.3) obținem

$$U = (aI/S) \rho_{ik}^0 u_i (\delta_{kl} + \Pi_{klmn} \sigma_{mn}) q_l. \quad (75.9)$$

În particular, dacă se măsoară diferența de potențial în direcția curentului, vectorii u și q coincid; pentru cristalele cu rezistența electrică izotropă, aceasta dă

$$U = (\rho^0 a I/S) (1 + \Pi_{klmn} q_k q_l \sigma_{mn}). \quad (75.10)$$

S-ar putea să fie de preferat ca diferența de potențial să fie proporțională cu tensiunile mecanice și să devină zero în absența lor. În cazul unor rezistențe electrice izotrope, pentru aceasta este necesar ca vectorii u și q să fie reciproc perpendiculari; atunci

$$U = (\rho^0 a I / S) \Pi_{klmn} u_k q_l \sigma_{mn}, \quad u_i q_i = 0 \quad (75.11)$$

(în cazul general, direcțiile u și q se iau astfel încît $\rho_{ik}^0 u_i q_k = 0$).

Concretizarea ulterioară a acestor forme se determină prin orientarea tensiunilor mecanice față de direcția curentului și direcția de măsurare a diferenței de potențial. Astfel, în cazul suprapunerii direcțiilor după care circulă curentul, după care se fac măsurătorile de diferență de potențial și a întinderii uniaxe, $\sigma = \sigma q q$, avem de-a face cu efectul piezorezistiv longitudinal

$$U = (\rho^0 a I / S) (1 + \sigma \Pi_{klmn} q_k q_l q_m q_n), \quad (75.12)$$

iar în cazul în care vectorii u și q sînt reciproc perpendiculari, iar direcția întinderii uniaxe coincide cu unul dintre ei (să zicem cu q)

$$U = (\rho^0 a I / S) \sigma \Pi_{klmn} u_k q_l q_m q_n \quad (u_i q_i = 0). \quad (75.13)$$

Anizotropia proprietăților piezorezistive a cristalelor semiconductoră se manifestă foarte puternic, așa cum o confirmă suprafețele efectului piezorezistiv longitudinal (fig. 75.1).

Pentru o cunoaștere mai amănunțită a fizicii efectului piezorezistiv și a aplicațiilor lui se pot consulta lucrările Mason (1967); Terston (1967); Mason (1966); Bir și Pikus (1972).

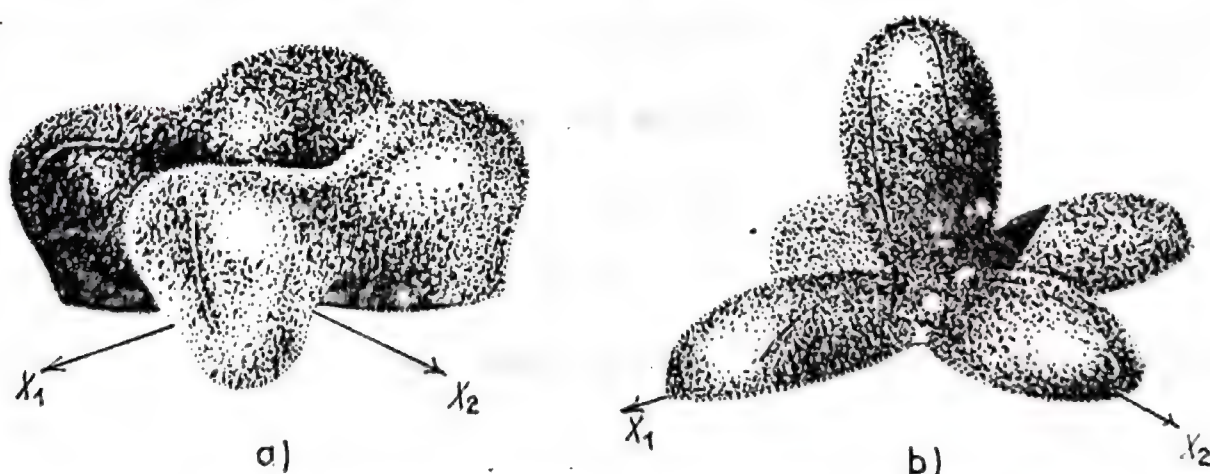


Fig. 75.1. Modele de suprafețe ale efectului piezorezistiv longitudinal în cristalele de siliciu (clasa $m3m$): a) cristal de tipul n , $\rho = 11,7 \Omega \cdot \text{cm}$; b) cristal de tipul p , $\rho = 7,8 \Omega \cdot \text{cm}$. Acestea sînt jumătățile superioare ale suprafețelor; cele inferioare sînt reflexiile lor în oglindă (Butabaev și Smislov, 1971).

§ 76. PRINCIPIUL LUI ONSAGER ȘI EFECTELE TERMOGALVANOMAGNETICE

În termodinamica proceselor reversibile un rol important îl are principiul simetriei coeficienților cinetici, al lui Onsager (v. de Groot și Masour, 1964; Haaze, 1967; Landau și Lifșit, 1954, § 25; 1964, § 122; 1965, § 33). Fie ca abaterea de la starea de echilibru să se exprime prin parametrii ξ_a , care, în starea de echilibru, sînt egali cu zero. Viteza de revenire a sistemului în starea de echilibru este caracterizată, în acești termeni, de derivatele $-\dot{\xi}_a$. Viteza, evident, este cu atît mai mare cu cît sînt mai mari abaterile sistemului de la starea de echilibru, depinzînd, în prima aproximație, liniar de acestea

$$-\dot{\xi}_a = A_{ab} \xi_b. \quad (76.1)$$

Cantitățile $J_a = -\dot{\xi}_a$, în termodinamica proceselor ireversibile se numesc *fluxuri*, iar expresiile

$$K_a = -\frac{\partial S}{\partial \xi_a}, \quad (76.2)$$

în care S este entropia constituie *forțele conjugate fluxurilor respective**.

Ca și fluxurile, forțele conjugate lor sînt diferite de zero doar în măsura în care sistemul se află într-o stare de neechilibru, dat fiind că la apropierea sistemului de starea de echilibru entropia sa crește, astfel încît în starea de echilibru atinge valoarea maximă: cînd toți $\xi_a = 0$, atunci toți $\partial S / \partial \xi_a = 0$. Evident, în prima aproximație și forțele depind tot liniar de parametrii de neechilibru, ξ_b

$$K_a = B_{ab} \xi_b.$$

Inversarea acestei relații are forma

$$\xi_b = C_{bc} K_c,$$

unde C este o matrice pătrată, inversă matricei B

$$C_{bc} B_{ca} = \delta_{ba}.$$

* Aceste „forțe” nu coincid în fond cu „forțele termodinamice generalizate”, X_a , introduse în capitolul 7. Pentru a sublinia aceasta, notațiile folosite sînt diferite (în lucrările asupra proceselor termodinamice ireversibile, menționate mai sus, forțele asociate fluxurilor sînt notate cu litera X).

Fluxurile și forțele conjugate lor sînt legate direct de viteza de creștere a entropiei în procesul apropierei sistemului de starea de echilibru. Într-adevăr,

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{\text{irev}} = \frac{\partial S}{\partial \xi_a} \frac{\partial \xi_a}{\partial t} = K_a J_a. \quad (76.3)$$

Trebuie să facem deosebire între viteza variației ireversibile a entropiei, dată de formula (76.3), care, conform principiului al doilea al termodinamicii, este totdeauna pozitivă, și viteza totală de variație a ei, care în cazul unei răcirii suficient de intense a cristalului, poate fi și negativă.

Se numesc *coeficienți cinetici*, \mathcal{L}_{ac} , coeficienții dependenței liniare a fluxurilor față de forțe

$$J_a = \mathcal{L}_{ac} K_c; \quad (76.4)$$

ei sînt legați de coeficienții A și C prin relațiile

$$\mathcal{L}_{ac} = A_{ab} C_{bc}.$$

Substituind în formula (76.3) valorile fluxurilor J_a , exprimate cu ajutorul relației (76.4), obținem

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{\text{irev}} = \mathcal{L}_{ab} K_a K_b. \quad (76.5)$$

Deoarece viteza variației ireversibile a entropiei în virtutea principiului al doilea al termodinamicii este totdeauna pozitivă, matricea \mathcal{L} este pozitiv definită.

Principiul simetriei coeficienților cinetici, al lui Onsager, constă în afirmația că matricea \mathcal{L} , pe lângă faptul că este pozitiv definită, este și simetrică

$$\mathcal{L}_{ac} = \mathcal{L}_{ca}. \quad (76.6)$$

Această formulare a principiului simetriei coeficienților cinetici este însă valabilă numai în măsura în care acești coeficienți nu depind de cîmpul magnetic (sau, în general, cîmpul magnetic este absent). În cazul în care însă coeficienții cinetici depind de cîmpul magnetic, \mathbf{H} , sînt valabile relații mai generale

$$\mathcal{L}_{ac}(\mathbf{H}) = \mathcal{L}_{ca}(-\mathbf{H}), \quad (76.7)$$

relațiile (76.6) reprezentînd cazul concret pentru $\mathbf{H} = 0$. Desigur că definirea pozitivă atît a relațiilor (76.6) și (76.7) este valabilă în aceeași măsură și pentru matricea \mathcal{E}^{-1} , care exprimă dependența liniară a forțelor față de fluxuri. În afară de aceasta, aici se presupune că mărimile $J_a = -\dot{\xi}_a$, denumite „fluxuri”, își schimbă semnul în cazul inversiei timpului (așa cum se întîmplă în cazul fluxurilor reale, de pildă fluxul de substanță, fluxul de căldură, curentul electric). Formulările (76.6) și (76.7) rămîn valabile și dacă J_a și J_e sînt ambele invariante la inversia timpului. Dacă însă la inversia timpului numai unul dintre ei își schimbă semnul, atunci formulările principiului Onsager, (76.6) și (76.7), se înlocuiesc cu formulările inversate

$$\mathcal{L}_{ac} = -\mathcal{L}_{ca}, \quad (76.6')$$

$$\mathcal{L}_{ac}(\mathbf{H}) = -\mathcal{L}_{ca}(-\mathbf{H}). \quad (76.7')$$

Pentru a ilustra cum se aplică principiul lui Onsager în situații concrete, vom examina procesul trecerii simultane printr-un cristal a fluxului de căldură și a curentului electric. El este determinat de un neechilibru esențial al cristalului — de existența în acesta a gradientului de temperatură, grad T , și a gradientului de potențial, grad $\varphi = -E$. Să notăm densitatea de curent electric cu \mathbf{j} , iar de flux de căldură cu \mathbf{q} . Densitatea fluxului total de energie va fi atunci $\mathbf{q} + \varphi\mathbf{j}$, în care φ este potențialul, iar $\varphi\mathbf{j}$ este fluxul de energie, legat de curentul electric. Să calculăm viteza de variație a entropiei

$$\frac{d\mathcal{S}}{dt} = \int_V \frac{1}{T} \frac{dU}{dt} dV = - \int_V \frac{\text{div}(\mathbf{q} + \varphi\mathbf{j})}{T} dV.$$

Observînd că $\text{div}(\mathbf{q} + \varphi\mathbf{j}) = \text{div} \mathbf{q} - \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ (aici s-a ținut cont că $\text{div} \mathbf{j} = 0$), vom scrie această derivată sub forma

$$\frac{d\mathcal{S}}{dt} = - \int_V \frac{\text{div} \mathbf{q}}{T} dV + \int_V \frac{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}{T} dV.$$

Transformăm prima integrală

$$\begin{aligned} - \int_V \frac{\text{div} \mathbf{q}}{T} dV &= - \int_V \text{div} \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) dV + \int_V \mathbf{q} \cdot \text{grad} \left(\frac{1}{T} \right) dV = \\ &= \oint_{\Sigma} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{T} d\Sigma - \int_V \frac{\mathbf{q} \cdot \text{grad} T}{T^2} dV. \end{aligned}$$

Integrala de suprafață caracterizează, evident, acea parte a vitezei de variație a entropiei care este determinată de admisia căldurii din afară; din această cauză, ea trebuie exclusă din $(d\mathcal{E}/dt)_{\text{irev}}$. Astfel, spre deosebire de $d\mathcal{E}/dt$,

$$\left(\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right)_{\text{irev}} = \int_V \left(-\frac{\mathbf{q} \cdot \text{grad } T}{T^2} + \frac{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}{T} \right) dV,$$

sau, trecînd la mărimile calculate pe unitatea de volum a cristallului.

$$\left(\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right)_{\text{irev}} = \mathbf{q} \cdot \left(-\frac{\text{grad } T}{T^2} \right) + \mathbf{j} \cdot \frac{\mathbf{E}}{T}. \quad (76.8)$$

Fluxul de căldură, \mathbf{q} , și densitatea de curent, \mathbf{j} , este normal să fie considerate fluxuri; atunci compararea formulei (76.8) cu formula (76.3) arată că forțele conjugate lor sînt, respectiv, vectorii $-(1/T^2) \text{grad } T$ și $(1/T)\mathbf{E} = -(1/T) \text{grad } \varphi$.

Relația (76.4) este concretizată acum sub forma

$$q_i = \mathcal{L}_{il} \left(-\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_l} \right) + \mathcal{L}_{i(3+m)} \left(\frac{E_m}{T} \right), \quad (76.9)$$

$$j_{kl} \mathcal{L}_{(3+k)l} \left(-\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_l} \right) + \mathcal{L}_{(3+k)(3+m)} \left(\frac{E_m}{T} \right),$$

iar principiul simetriei coeficienților cinetici susține că matricea \mathcal{L} este simetrică, adică $\mathcal{L}_{ab} = \mathcal{L}_{ba}$.

Dacă notăm

$$\frac{1}{T^2} = \mathcal{L}_{il} = \lambda_{il}^*, \quad \frac{1}{T} \mathcal{L}_{(3+k)(3+m)} = \sigma_{km}, \quad \frac{1}{T^2} \mathcal{L}_{(3+k)l} = \beta_{kl},$$

atunci, din principiul lui Onsager rezultă că

$$\lambda_{il}^* = \lambda_{li}^*, \quad \sigma_{km} = \sigma_{mk}, \quad \frac{1}{T} \mathcal{L}_{i(3+m)} = T \beta_{mi}$$

astfel încît (76.9) se scriu sub forma

$$\begin{aligned} q_i &= -\lambda_{ii}^* \frac{\partial T}{\partial x_i} + T\beta_{mi} E_m, \\ j_k &= -\beta_{ki} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sigma_{km} E_m. \end{aligned} \quad (76.10)$$

Prin urmare, λ^* este tensorul coeficienților de conductibilitate termică în absența cîmpului electric, iar σ este tensorul coeficienților rezistivității în absența gradientului termic; ambii tensori sînt pozitivi definiți și simetrici. Coeficienții β_{ki} exprimă însă apariția unui curent electric datorită existenței în conductor a unui gradient de temperatură, adică efectul termoelectric. Tot ei exprimă fluxul termic care ia naștere în absența gradientului de temperatură, sub acțiunea cîmpului electric. Simetria internă a tensorului β este V^2 .

În afară de aceasta, matricea \mathcal{L} este pozitiv definită. De aici rezultă, în particular, că elementele ei diagonale sînt pozitive, iar pătratele produselor nediagonale sînt mai mici decît pătratele produselor diagonale corespunzătoare (de comparat cu § 63); de exemplu,

$$\begin{aligned} \lambda_{11}^* > 0, \quad \sigma_{33} > 0, \quad \lambda_{12}^{*2} < \lambda_{11}^* \lambda_{22}^*, \quad \sigma_{23}^2 < \sigma_{22} \sigma_{33}, \\ T\beta_{11}^2 < \lambda_{11}^* \sigma_{11}, \quad T\beta_{12}^2 < \lambda_{22}^* \sigma_{11}. \end{aligned}$$

Fenomenele termoelectrice din cristale sînt descrise de cele mai dese ori de ecuații de material echivalente cu (76.10), în care, însă drept variabile independente sînt luate grad T și j

$$\begin{aligned} E_i &= \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m}, \\ q_i &= T\alpha_{ki} j_k - \lambda_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m}. \end{aligned} \quad (76.11)$$

Un calcul simplu arată că coeficienții rezistivității, ρ_{ik} , coeficienții de conductibilitate termică în absența curentului electric, λ_{im} , și coeficienții termoelectrice, α_{ki} , sînt legați de coeficienții σ_{km} , λ_{ii}^* , β_{ki} , introduși mai înainte, prin relațiile

$$\rho_{ik} \sigma_{km} = \delta_{im}, \quad \alpha_{im} = \rho_{ik} \beta_{km}, \quad \lambda_{im} = \lambda_{im}^* - T\rho_{ik} \beta_{il} \beta_{km}.$$

Relația dintre coeficientul lui $\partial T / \partial x_n$ din prima dintre ecuațiile (76.11) și coeficientul lui j_k din a doua dintre ecuații poate fi dedusă și direct din principiul lui Onsager, considerînd formal drept „fluxuri” pe E și q ; atunci drept „forțe” vor apărea $(-1/T^2)$ grad T și j/T . Însă întrucît în cazul inversiei timpului q își schimbă semnul, iar E nu și-l modifică, formularea principiului Onsager pentru coeficienți nu are forma (76.6), ci (76.6'); tocmai de aceea ei au același semn, nu semne contrare, ca în cazul coeficienților analogi din ecuația de material (76.10).

Simetria coeficienților cinetici, care depind de cîmpul magnetic, o vom analiza pe exemplul efectelor termogalvanomagnetice, adică a fenomenelor cinetice care apar într-un cristal prin care trece un flux termic și un curent electric, cînd este introdus într-un cîmp magnetic (asupra fizicii fenomenului termogalvanomagnetic se pot vedea amănunte, de pildă, în Vonsovski, 1981). Vom pleca de la o ecuație de material de tipul (76.11), limitîndu-ne la termenii liniari în cîmpul magnetic (evident, termenii pătratici analogi nu depind de cîmpul magnetic, cei cubici depind liniar etc.)

$$E_i = (\mathfrak{L}_{ik}^{(0)} + \mathfrak{L}_{ikn}^{(1)} H_n) \left(\frac{1}{T} j_k \right) + \\ + (\mathfrak{L}_{i(3+m)}^{(0)} + \mathfrak{L}_{i(3+m)n}^{(1)} H_n) \left(-\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_m} \right), \quad (76.12)$$

$$q_l = (\mathfrak{L}_{(3+l)k}^{(0)} + \mathfrak{L}_{(3+l)kn}^{(1)} H_n) \left(\frac{1}{T} j_k \right) + \\ + (\mathfrak{L}_{(3+l)(3+m)}^{(0)} + \mathfrak{L}_{(3+l)(3+m)n}^{(1)} H_n) \left(-\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_m} \right).$$

Folosind relația de simetrie (76.7'), vom realiza legătura dintre coeficienții

$$\mathfrak{L}_{abn}^{(1)} = (\partial \mathfrak{L}_{ab} / \partial H_n)_{H=0}$$

și coeficienții termogalvanomagnetici

$$\mathfrak{L}_{ikn}^{(1)} = -\mathfrak{L}_{kin}^{(1)} = -T \delta_{ikp} R_{pn},$$

$$\mathfrak{L}_{(3+l)(3+m)n}^{(1)} = -\mathfrak{L}_{(3+m)(3+l)n}^{(1)} = T^2 \delta_{lmp} L_{pn},$$

$$\mathfrak{L}_{i(3+m)n}^{(1)} = \mathfrak{L}_{(3+m)in}^{(1)} = T^2 N_{imn},$$

atunci ecuațiile de material, (76.12), vor căpăta forma

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} - \delta_{ikp} R_{pn} H_n j_k - N_{imn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}, \quad (76.13)$$

$$q_i = T \alpha_{ki} j_k - \lambda_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} + T N_{kin} H_n j_k - \delta_{imp} L_{pn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}.$$

Simetria internă și denumirea tensorilor efectelor termogalvanomagnetice sînt următoarele:

$\mathbf{R} \sim V^2$ — tensorul coeficienților Hall;

$\mathbf{L} \sim V^2$ — tensorul coeficienților Leduc-Righi;

$\mathbf{N} \sim \varepsilon V^3$ — pseudotensorul coeficienților Nernst-Ettingshausen.

Ei determină: influența cîmpului magnetic asupra conductibilității electrice (efectul Hall), influența cîmpului magnetic asupra forței termoelectromotoare (efectul Nernst) și, legat de aceasta, influența cîmpului magnetic asupra fluxului termic creat de curentul electric ce trece prin conductor (efectul Ettingshausen) și, în fine, influența cîmpului magnetic asupra conductibilității termice (efectul Leduc-Righi). În particular, pentru corpurile izotrope avem

$$R_{pn} = R \delta_{pn}, \quad L_{pn} = L \delta_{pn}, \quad N_{imn} = N \delta_{imn},$$

astfel încît ecuațiile de material (76.13) capătă forma

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + \alpha \text{grad} T + \mathbf{R} \mathbf{H} \times \mathbf{j} + \mathbf{N} \mathbf{H} \times \text{grad} T, \quad (76.14)$$

$$\mathbf{q} = T \alpha \mathbf{j} - \lambda \text{grad} T + T \mathbf{N} \mathbf{H} \times \mathbf{j} + \mathbf{L} \mathbf{H} \times \text{grad} T.$$

Așadar, într-un corp izotrop, pentru efectele termogalvanomagnetice, liniare în raport cu \mathbf{H} , este esențială numai componenta magnetică perpendiculară pe curent, sau, respectiv, pe gradientul de temperatură, variația vectorilor intensitate a cîmpului electric și a fluxului termic fiind, la rîndul lor, perpendiculare pe cîmpul magnetic care le-a determinat apariția.

Efectul termoelectric și efectul termogalvanomagnetic sînt tratate mai detaliat în Landau și Lifșit (1957); principiul lui Onsager, aplicat în mod special la cristale (nemagnetice) precum și fenomenele termoelectrice sînt tratate amănunțit de Nye (1967). În partea ce a mai rămas din acest paragraf, vom examina generalizarea noțiunilor introduse la cristalele magnetice.

Nu demult, s-a remarcat (Kleiner, 1966) că relațiile (76.6) și (76.7) pot fi interpretate ca o confirmare a faptului că la inversia timpului, I' , matricea coeficienților cinetici se transpune (în cazul în care sînt valabile relațiile (76.6') și (76.7')), matricea coeficienților cinetici se transpune și se înmulțește cu -1) drept care principiul simetriei coeficienților cinetici în tratarea sa inițială este valabil numai în cazul corpurilor nemagnetice, în al căror grup de simetrie intră operația I' , pe cînd pentru cristalele magnetice vor fi necesare modificări corespunzătoare. Că formularea obișnuită, (76.6), a principiului simetriei coeficienților cinetici nu este valabilă pentru cristalele magnetice reiese clar chiar și din faptul că influența asupra conductibilității electrice și conductibilității termice a cristalelor magnetice, exercitată de momentul lor magnetic propriu, poate fi tratată drept efecte Hall și Leduc-Righi spontane, care provoacă apariția componentelor antisimetrice a tensorilor rezistenței electrice și conductibilității termice.

Prin urmare, procesele electro- și termoconductoare din cristalele clasei magnetice 1 (precum și $\bar{1}$ — vezi mai jos) sînt descrise de ecuațiile

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} \quad (76.15)$$

$$q_i = T \gamma_{ik} j_k - \lambda_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m},$$

în care ρ , α , γ , λ sînt niște tensori de rangul doi nesimetrice în raport cu indicii, care nu sînt legați între ei prin nici un fel de relații, în afară de inegalitățile ce rezultă din definirea pozitivă a matricei coeficienților cinetici. Principiul lui Onsager are însă influență asupra formei acestor tensori numai în cazul prezenței unei anumite simetrii magnetice; această influență se exprimă prin aceea că sub acțiunea rotației R ele se transformă în $R\rho$, $R\alpha$, $R\gamma$ și $R\lambda$, sub acțiunea inversiei timpului, I' , se transpune matricea \mathcal{E} , iar sub acțiunea operației $R' = I'R$ are loc combinarea ambelor transformări. Totodată, pentru toate operațiile g , care fac parte din grupul punctual al simetriei magnetice a cristalului, avem $g\mathcal{E} = \mathcal{E}$. În particular, pentru operațiile de forma $R' = I'R$, definite de matricea de rotație $\|r_{i'k}\|$, această condiție înseamnă că componentele tensorilor ρ și λ satisfac egalitățile

$$(r_{i'l} r_{j'k} - \delta_{i'k} \delta_{jl}) \rho_{kl} = 0, \quad (76.16)$$

iar componentele tensorilor α și γ egalitățile

$$r_{i'l} r_{j'k} \alpha_{kl} = \delta_{i'k} \delta_{jl} \gamma_{kl}. \quad (76.17)$$

Pe lângă aceasta, trebuie să avem în vedere că tensorii ρ , λ , α , γ (ca și pseudotensorii care descriu efectele termogalvanomagnetice) au centru de simetrie, din care cauză, sînt aceiași pentru toate grupurile magnetice care fac parte dintr-o clasă Laue, adică sînt reunite într-o aceeași celulă a coloanei G_1 din tabelul 72.4. Clasele Laue pentru grupurile magnetice, după cum se vede din acest tabel, se subîmpart în trei tipuri: albe, alb-negre și cenușii. În clasele Laue albe intră numai grupurile albe și anume, toate. În clasele Laue cenușii, alături de grupurile cenușii, $G1'$, intră și grupurile alb-negre, $G\bar{1}'$, printre elementele cărora există și centrul de antisimetrie $\bar{1}'$. În sfîrșit, în clasele Laue alb-negre intră numai grupurile alb-negre, și anume acelea dintre ele care nu conțin elementul $\bar{1}'$.

Din aceste considerații, pentru clasele cenușii Laue, adică pentru grupurile $G1'$ și $G\bar{1}'$, obținem enunțul clasic al principiului lui Onsager

$$\rho_{ik} = \rho_{ki}, \quad \lambda_{ik} = \lambda_{ki}, \quad \gamma_{ik} = \alpha_{ki}$$

toți acești tensori fiind invarianți față de G . Pentru grupurile albe, G , tensorii ρ , λ , α , γ sînt invarianți față de G , însă în general, ei nu sînt simetrici în raport cu indicii, nefiind în nici un fel legați între ei. Pentru clasele Laue alb-negre, cu ajutorul relațiilor (76.16) și (76.17), se deduc însă reguli speciale: acestea sînt cuprinse în tabelul 76.1.

Coeficienții termogalvanomagnetici, adică pseudotensorii de rangul trei, care dau corecțiile coeficienților fundamentali, liniare în raport cu \mathbf{H} , se deduc analog (v. Kleiner, 1969). Cînd simetria lipsește cu desăvîrșire,

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} - P_{ikn} H_n j_k - N_{im} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}, \quad (76.18)$$

$$q_i = T\gamma_{ik} j_k - \lambda_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} - TM_{ikn} H_n j_k - Q_{imn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}.$$

Prin urmare, în acest caz, matricea $(\partial \mathcal{L} / \partial \mathbf{H})_0$ este definită de patru pseudotensori de rangul trei, \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{N} și \mathbf{M} , nelegați între ei și care nu au nici un fel de simetrie internă. Deoarece inversia timpului, I' , nu numai că transpune matricea $(\partial \mathcal{L} / \partial \mathbf{H})_0$, ci îi schimbă și semnul, din faptul că în grupul de simetrie magnetică a unui cristal există operația $R' = I'R$, rezultă relațiile analoage cu (76.16), pentru tensorii \mathbf{P} și \mathbf{Q}

$$(r_{i'm} r_{j'l} r_{k'n} + \delta_{i'l} \delta_{j'm} \delta_{k'n}) P_{lmn} = 0 \quad (76.19)$$

Tabelul 76.1

Coefficienții cinetici ai proceselor de conductibilitate electrică și de conductibilitate termică în cristalele magnetice din clasele Laue alb-negre

$2'/m'$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ -\rho_{13} & -\rho_{23} & \rho_{33} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & \alpha_{21} & -\alpha_{31} & \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & -\alpha_{32} & \lambda_{12} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ -\alpha_{13} & -\alpha_{23} & \alpha_{33} & -\lambda_{13} & -\lambda_{23} & \lambda_{33} \end{array}$	$4'/mmm'$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{22} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$
$mm'm'$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & \rho_{12} & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ -\rho_{12} & \rho_{22} & 0 & \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & -\alpha_{21} & 0 & \lambda_{11} & \lambda_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & \alpha_{22} & 0 & -\lambda_{12} & \lambda_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$	$6'/m$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & -\alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ \alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$
∞/mm' $6/mm'm$ $4/mm'm'$ $3m'$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & \rho_{12} & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ -\rho_{12} & \rho_{11} & 0 & -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & \lambda_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 & -\lambda_{12} & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$	$6'/m'mm$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$
$4'/m$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{22} & -\alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ -\alpha_{21} & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{array}$	$m3m'$	$\begin{array}{cccccc} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} \\ \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} \end{array}$

și pentru M și N relațiile analoage relațiilor (76.17)

$$-r'_{i'm} r'_{j'l} r'_{k'n} N_{lmn} = \delta_{i'l} \delta_{j'm} \delta_{k'n} M_{lmn}. \quad (76.20)$$

Folosind aceste relații se poate găsi forma matricei $(\partial \mathcal{E} / \partial \mathbf{H})_0$ și a pseudotensorilor care intră în ecuația (76.18), pentru toate clasele Laue alb-negre.

Dintre coeficienții termogalvanomagnetici, cel mai mare interes îl prezintă, probabil, coeficienții Hall. În timp ce în cristalele nemagnetice efectul Hall este descris de un tensor de rangul doi, R (în general nesimetric), în cristalele magnetice, pentru aceasta este nevoie de pseudotensorul nesimetric de rangul trei, P . Acesta este însă comod să-l descompunem într-o parte antisimetrică și alta simetrică, în raport cu primii doi indici, partea antisimetrică putând fi exprimată printr-un tensor de rangul doi

$$P_{ikn} = \delta_{ikp} R_{pn} + S_{ikn},$$

$$S_{ikn} = \frac{1}{2} (P_{ikn} + P_{kin}), \quad R_{pn} = \frac{1}{2} \delta_{pik} P_{ikn}.$$

Fiecare dintre aceste părți, pentru orice clasă G de simetrie magnetică, poate fi ușor determinată din tabele. Evident, partea antisimetrică este invariantă nu numai în raport cu vechiul grup, $G\bar{1}$ al clasei Laue, căruia îi aparține G , ci și față de grupul $G11'$. Pentru el găsim din tabelul E.6 forma tensorului R , după care se pot reconstitui ușor și $\delta_{ikp} R_{pn}$. Pentru a deduce forma părții simetrice, trebuie să definim tensorul piezomagnetic pentru clasa Laue dată, $G\bar{1}$ (un procedeu simplu este expus în § 73), după care nu ne mai rămâne decât să permutăm indicii astfel încât indicii în raport cu care tensorul este simetric, să fie în față.

Termenii pătratici în H din funcția care exprimă dependența rezistivității de cîmpul magnetic se introduce prin tensorul de rangul patru, T , astfel încît

$$E_i = (\rho_{ik} + P_{ikm} H_m + T_{ikmn} H_m H_n) j_k.$$

Tensorul T se numește *tensorul magnetorezistenței*. El este, evident, totdeauna simetric în raport cu ultimii doi indici

$$T_{ikmn} = T_{iknm}. \quad (76.21)$$

În toate clasele Laue cenușii el este totodată simetric și în raport cu primii doi indici ($T_{ikmn} = T_{kimn}$), astfel încît forma sa poate fi găsită folosind tabelul E.19. În clasele Laue albe, tensorul T nu este, în general, simetric în raport cu primii doi indici; deci forma lui rămîne să fie determinată din tabelul E.21. În fine, forma tensorului magnetorezistenței din clasele Laue alb-negre este determinată plecînd de la faptul că în cazul în care grupul de simetrie magnetică a cristalului conține operația $R' = I'R$, atunci

$$(r'_{i'n} r'_{j'm} r'_{k'p} r'_{l'q} - \delta_{i'm} \delta_{j'n} \delta_{k'p} \delta_{l'q}) T_{mnpq} = 0, \quad (76.22)$$

ceea ce reprezintă analogul relațiilor (76.16) și (76.19). Forma tensorului magnetorezistenței pentru toate cele 10 clase Laue cristalografice, alb-negre, care rezultă din relațiile (76.21) și (76.22) este dată de Pantulu și Sudarshan (1970).

§ 77. EFECTUL ELECTROOPTIC ȘI EFECTUL PIEZOOPTIC

Modificările proprietăților optice ale cristalelor sub acțiunea cîmpului electric și a tensiunilor mecanice au fost observate încă din secolul al XIX-lea, fiind folosite pe scară largă în practică.

Sub acțiunea câmpului electric E și a tensiunilor mecanice, σ , tensorul impermitivității dielectrice a cristalului, $\eta = \eta(\omega)$, variază extrem de puțin, căpătînd valoarea $\eta + \zeta$, în care tensorul simetric de rangul doi, $\zeta = \zeta(E, \sigma)$, reprezintă o creștere infinit mică a tensorului impermitivității dielectrice (v. § 20). Deoarece suprafața caracteristică a tensorului impermitivității dielectrice, η , este indicatricea optică

$$\eta_{ij} x_i x_j = 1,$$

efectele pe care le studiem le putem reprezenta intuitiv ca rezultat al deformării indicatricei optice a cristalului sub acțiunea câmpului electric sau al tensiunilor mecanice.

Variația impermitivității dielectrice a unor substanțe sub acțiunea tensiunilor mecanice cu frecvențe optice se numește *efect piezooptic*, sau *fotoelasticitate* (efectul piezooptic a fost descoperit de Brewster, la început la corpurile izotrope transparente, iar mai apoi și la cristale — Brewster, 1818). În cazul cristalelor, o precizie suficientă este dată de aproximația de ordinul întâi, liniară

$$\zeta = \pi : \sigma, \quad \zeta_{ij} = \pi_{ijkl} \sigma_{kl}. \quad (77.1)$$

Tensorul de rangul patru, π , se numește *tensorul coeficienților piezooptici*. Deoarece tensorul ζ este simetric, tensorul π este simetric în raport cu prima pereche de indici, iar datorită simetriei lui σ , π este simetric și în raport cu a doua pereche. Prin urmare,

$$\pi_{ijkl} = \pi_{jikl} = \pi_{ijlk} = \pi_{jilk}, \quad (77.2)$$

adică simetria lui interioară va fi $[V^2]^2$. Efectul piezooptic este posibil în mediile cu orice simetrie, inclusiv în corpurile izotrope. Forma generală a tensorului coeficienților piezooptici într-un sistem de coordonate cristalofizic este dată, pentru cristalele tuturor claselor, în tabelul E.19. În acest caz, componentele $\pi_{\lambda\mu}$ corespund exprimării efectului piezooptic sub forma

$$\zeta_\lambda = \pi_{\lambda\mu} \sigma_\mu, \quad (77.3)$$

în care se ia

$$\begin{aligned} \zeta_\lambda &= \zeta_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6), \\ \sigma_\mu &= \sigma_{kl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6). \end{aligned} \quad (77.4)$$

De aici obținem (v. anexa F) regulile pentru transcrierea în noile notații

$$\pi_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (77.5)$$

Variația tensorului impermitivității dielectrice se poate exprima și prin deformații

$$\zeta = p : \varepsilon, \quad \zeta_{ij} = p_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (77.6)$$

Tensorul p se numește *tensorul coeficienților elastooptici*. Simetria lui internă coincide cu simetria internă a tensorului π . În scrierea contrasă, formula (77.6) capătă forma

$$\zeta_\lambda = p_{\lambda\mu} \varepsilon_\mu. \quad (77.7)$$

Plecînd de la regulile de exprimare în noile notații pentru ζ_λ , (77.4), și pentru ε_μ , (F.4), obținem

$$p_{\lambda\mu} = p_{ijkl} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6). \quad (77.8)$$

Forma generală a tensorului coeficienților elastooptici într-un sistem de coordonate cristalofizic, pentru cristalele tuturor claselor, este dată în tabelul E.19; unele deosebiri dintre relațiile care leagă între ei coeficienții lui $\pi_{\lambda\mu}$ de ai lui $p_{\lambda\mu}$ se explică prin diferența ce există între regulile de calcul pentru a trece la noile notații în (77.5) și (77.8). Coeficienții elastooptici, pentru cîteva cristale, sînt dați în tabelul 77.1.

Tabelul 77.1

Coeficienții elastooptici, $p_{\lambda\mu}$, ai unor cristale

Cristalul	Clasa	Indicii $\lambda\mu$							
		11	33	4	12	13	14	31	41
Diamant	$m3m$	-0,31		-0,012	-0,09				
NaCl	$m3m$	0,137		-0,108	0,178				
KCl	$m3m$	0,211		0,024	0,156				
NaBrO ₃	$m3$	0,185		-0,0139	0,218	0,213			
NaClO ₃	$m3$	0,173		-0,0187	0,258	0,223			
Safir	$\bar{3}m$	-0,23	-0,20	-0,10	-0,03	0,02	0,00	-0,04	0,00
LiNbO ₃	$3m$	0,034	0,094	0,30	0,072	0,096	0,066	0,178	0,154
Calcit	$\bar{3}m$	0,095	0,178	-0,090	0,189	0,215	-0,006	0,309	0,01
Cuarț α	32	0,137	0,0973	-0,0685	0,249	0,258	-0,029	0,257	-0,042
Cuarț topit	$\infty\infty m$	0,121		-0,075	0,270				

Întrucît deformările elastice și tensiunile sînt legate între ele prin legea lui Hooke,

$$\varepsilon = s : \sigma, \quad \sigma = c : \varepsilon,$$

se poate stabili ușor legătura dintre coeficienții piezooptici și coeficienții elastooptici

$$p_{\lambda\mu} = \pi_{\lambda\nu} c_{\nu\mu}, \quad \pi_{\lambda\mu} = p_{\lambda\nu} s_{\nu\mu}. \quad (77.9)$$

Cînd un cristal este supus nu numai deformărilor elastice, ci și deformărilor plastice, situația se complică. Markovski, Poluhin și Șaskolskaia (1966) au arătat pe exemplul monocristalelor de clorură de argint, deformate plastic, că pentru acest material și în domeniul plastic, pînă la deformări de inclusiv 20%, are loc o dependență liniară a variației tensorului impermitivității dielectrice η în funcție de tensorul tensiunilor, σ , ce se poate exprima prin relațiile (77.1) și (77.3) și chiar cu aceiași coeficienți, pe cînd formulele (77.6) și (77.7) nu mai sînt valabile: deformările indicatricii optice sînt determinate nu de deformarea totală, ε , ci numai de partea elastică a acesteia.

Tensorul coeficienților elastooptici, p , joacă un rol important în efectul Mandelștam-Brillouin, adică în împrăștierea luminii pe vibrațiile elastice termice ale cristalului (împrăștierea luminii în cristale este studiată în monografia lui Fabelinski (1965)). O undă elastică (hipersonoră) cu deplasarea

$$u = Ap \exp [(2\pi i/\lambda) (m \cdot r - vt)]$$

(v. §56), deformînd un cristal provoacă o variație a indicatricii optice de forma

$$\zeta_{ij}(\varepsilon) = p_{ijkl} \varepsilon_{kl},$$

în care tensorul micilor deformații este

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} (\partial u_k / \partial x_l + \partial u_l / \partial x_k).$$

În acest caz, datorită simetriei tensorului coeficienților elastooptici, p_{ijkl} , în raport cu ultimii doi indici, $\zeta_{ij}(\varepsilon)$ poate fi exprimat sub forma

$$\zeta_{ij}(\varepsilon) = p_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}. \quad (77.10)$$

Împrăștierea Mandelștam-Brillouin reprezintă în fond o difracție a luminii pe o structură periodică,

$$\zeta_{ij} = Z_{ij} \exp [(2\pi i/\lambda) (m \cdot r - vt)].$$

însoțită de efectul Doppler, determinată de mișcarea acestei structuri cu viteza hipersunetului, v . Nu demult s-a remarcat (Nelson, Lax, 1970) că rotațiile elementelor unui volum al cristalului considerat ca un întreg, provocate de o undă elastică,

$$\omega_{kl} = (A\pi l/\lambda) (p_k m_l - m_k p_l) \exp [2\pi i l/\lambda] (\mathbf{m} \cdot \mathbf{r} - vt),$$

în cazul prezenței unei duble refracții naturale nu prea mici a cristalului, dau o contribuție sesizabilă la împrăștierea Mandelștam-Brillouin. Într-adevăr, în cazul unor asemenea rotații, indicatrica optică a elementului de volum se rotește împreună cu acesta. Coeficienții indicatricei optice rotite astfel față de sistemul de coordonate imobil, adică de sistemul legat de întregul cristal, sînt egali cu

$$\eta_{ij}^* = c_{k'i} c_{l'j} \eta_{k'l},$$

în care $\eta_{k'l}$ sînt coeficienții indicatricei optice, raportați la sistemul rotit, iar $c_{k'i}$ sînt elementele matricei de transformare. Deoarece, conform formulei (17.7), pentru un unghi de rotație mic

$$c_{k'i} = \delta_{k'i} + \delta_{k'ij} \varphi_j,$$

tensorul micilor rotații fiind legat de unghiul de rotație prin relația

$$\omega_{kl} = -\delta_{klj} \varphi_j$$

ce rezultă direct din formula (49.6), coeficienții căutați ai indicatricei optice rotite vor fi egali cu

$$\eta_{ij}^* = (\delta_{ki} - \omega_{ki}) (\delta_{lj} - \omega_{lj}) \eta_{kl}. \quad (77.11)$$

Indicii de însumare cu semnul prim au fost înlocuiți aici prin indicii fără acest semn; firește, aceasta nu modifică suma, însă este mai comodă pentru interpretare: prin η_{kl} se subînțeleg coeficienții indicatricei optice a cristalului în absența acțiunilor exterioare, raportate la sistemul de coordonate imobil. Variațiile componentelor tensorului impermitivității dielectrice, determinate de rotație, sînt egale cu

$$\zeta_{ij}(\omega) = \eta_{ij}^* - \eta_{ij}.$$

Înlocuind aici valoarea lui η_{ij}^* din formula (77.11) și neglijînd termenii pătratici în ω , obținem

$$\zeta_{ij}(\omega) = -\eta_{il} \omega_{lj} - \eta_{kj} \omega_{kl}.$$

Avînd în vedere antisimetria tensorului ω , acest rezultat poate fi scris sub forma

$$\zeta_{ij}(\omega) = (\eta_{il} \delta_{jk} - \eta_{kj} \delta_{il}) \omega_{kl}.$$

Să facem tensorul $\eta_{il} \delta_{jk} - \eta_{kj} \delta_{il}$ antisimetric în raport cu indicii k și l . Notînd rezultatul antisimetrizării cu $q_{il[kl]}$, obținem

$$q_{il[kl]} = \frac{1}{2} (\eta_{il} \delta_{jk} - \eta_{kj} \delta_{il} + \eta_{lj} \delta_{ik} - \eta_{ik} \delta_{lj}). \quad (77.12)$$

La înmulțirea tensorului $q_{ij[kl]}$ cu ω_{kl} se obține același rezultat ca și pentru $\eta_{ii} \delta_{jk} - \eta_{kj} \delta_{ii}$, însă

$$q_{ij[kl]} \epsilon_{kl} = 0,$$

de aceea, $\zeta_{ij}(\omega)$ poate fi calculat și din distorsiunea $\partial u / \partial r$

$$\zeta_{ij}(\omega) = q_{ij[kl]} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \quad (77.13)$$

Comparând (77.10) cu (77.13) vedem că se poate forma un tensor generalizat al coeficienților elastooptici, nesimetric în raport cu ultimii indici

$$q_{ijkl} = p_{ijkl} + q_{ij[kl]} \quad (77.14)$$

(tensorul obișnuit al coeficienților elastooptici, p , este în acest caz partea simetrică: $p_{ijkl} = q_{ij[kl]}$) și cu ajutorul lui să exprimăm variațiile totale ale coeficienților indicatricei optice,

$$\zeta = \zeta(\epsilon) + \zeta(\omega)$$

sub forma

$$\zeta_{ij} = q_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad \zeta = q : \frac{\partial u}{\partial r} \quad (77.15)$$

Remarcăm că tensorul $q_{ij[kl]}$ nici măcar nu este definit de întregul tensor q , ci numai cu deviatorul lui, din care cauză tensorul q nu are în general $6 \cdot 9 = 54$ componente independente, cum ar trebui să fie în cazul unui tensor cu simetria internă $[V^2]$ V^2 , ci numai 41; cu 5 mai multe decât tensorul p , de simetrie internă $[V^2]^2$.

Să examinăm acum efectul câmpului electric asupra indicatricei optice a cristalului. Vom începe cu efectul electrooptic liniar, denumit și *efectul Pockels* (Pockels, 1894). El este descris de formula

$$\zeta = \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}, \quad \zeta_{ij} = r_{ijk} E_k. \quad (77.16)$$

Tensorul de rang trei, \mathbf{r} , se numește *tensorul coeficienților electrooptici*. Datorită simetriei tensorului ζ , simetria internă a tensorului \mathbf{r} este aceeași cu a tensorului coeficienților piezoelectricei, \mathbf{d} . Rezultă clar deci că efectul electrooptic liniar este posibil numai în acele cristale a căror simetrie permite existența proprietăților piezoelectrice. Scrierea contrasă a formulei (77.16) este de forma

$$\zeta_\lambda = r_{\lambda k} E_k; \quad (77.17)$$

conform relației (77.4), regula de transcriere, în noile notații, va fi

$$r_{\lambda k} = r_{ijk} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6). \quad (77.18)$$

Forma generală a tensorului r pentru toate clasele cristalografice este dată în tabelul E.11, iar valorile pentru unele cristale, în tabelul 77.2.

Tabelul 77.2

Coeficienții electrooptici, $r_{\mu k}$, ai unor cristale ($\lambda = 546 \text{ nm}$), în 10^{-8} unit. CGS-1

Cristalul	Clasa	Indicii μk					
		13	22	33	41	42	63
CuCl	$\bar{4}3m$				18,3		
ZnS	$\bar{4}3m$				6,0		
KDP	$\bar{4}2m$				26,0		32,0
ADP	$\bar{4}2m$				72,0		26,0
CdS	$6mm$	3,3		7,2		11,1	
$\text{Ba}_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$	$4mm$	54,0		170,0		45,0	
LiNbO_3	$3m$	25,8	12,0	92,4		84,0	

Coeficienții electrooptici depind, în general, de condițiile de măsurare. Importanță practică au două situații: 1) tensiunile mecanice sînt egale cu zero (cristalul este liber din punct de vedere mecanic și se poate deforma datorită efectului piezoelectric invers) — coeficienții electrooptici corespunzători îi vom nota cu $r^{(o)}$; 2) cristalul este total lipsit de posibilitatea de a se deforma (este fixat mecanic) — acestui caz îi corespund coeficienții $r^{(e)}$. Pentru a calcula diferența $r^{(o)} - r^{(e)}$, vom studia acțiunea simultană a efectelor electrooptic și piezooptic precum și deformările care iau naștere în cristal sub acțiunea cîmpului electric și a cîmpului tensiunilor mecanice

$$\zeta_\lambda = r_{\lambda k} E_k + \pi_{\lambda \mu} \sigma_\mu, \quad (77.19)$$

$$\varepsilon_\kappa = d_{\kappa k} E_k + s_{\kappa \mu} \sigma_\mu.$$

Aici d și s sînt tensorii coeficienților piezoelectrici și ai coeficienților deformabilității elastice. Cînd cristalul este fixat mecanic, $\varepsilon = 0$, astfel încît,

$$\sigma_\mu = -c_{\mu \kappa} d_{\kappa k} E_k.$$

Din această cauză, într-un cristal fixat mecanic corecția electrooptică la tensorul impermitivității dielectrice este egală cu

$$\zeta_\lambda = (r_{\lambda k}^{(o)} - d_{\kappa k} c_{\mu \kappa} \pi_{\lambda \mu}) E_k. \quad (77.20)$$

Evident, expresia din paranteză reprezintă tocmai coeficienții electrooptici ai unui cristal fixat mecanic. Folosindu-ne de formula (77.9) putem exprima relația dintre coeficienții electrooptici ai unui cristal liber și cînd este fixat mecanic sub forma

$$r_{\lambda k}^{(\sigma)} - r_{\lambda k}^{(e)} = d_{\lambda x} p_{\lambda x}. \quad (77.21)$$

După cum s-a menționat deja, efectul electrooptic liniar este posibil numai în cristalele care fac parte din clasele de simetrie piezoelectrică. În același timp însă, dubla refracție artificială sub acțiunea cîmpului electric se observă și la substanțele a căror simetrie exclude, evident, posibilitatea efectului piezoelectric, în particular, în corpurile izotrope — în lichide și chiar în gaze. În toate aceste cazuri însă efectul este proporțional nu cu intensitatea cîmpului electric, ci cu pătratul ei, fără să se modifice la schimbarea sensului cîmpului electric în sens contrar. Acesta este *efectul electrooptic pătratic*, sau *efectul Kerr*.

Corecția la tensorul impermitivității dielectrice, determinată de efectul electrooptic pătratic, are forma

$$\zeta_{ij} = K_{ijkl} E_k E_l, \quad \zeta_\lambda = K_{\lambda\mu} (EE)_\mu, \quad (77.22)$$

în care regulile de retranscriere pentru ζ_λ sînt date de formula (77.4), iar pentru $(EE)_\mu$, de formula

$$(EE)_\mu = E_k E_l \quad (kl \leftrightarrow 1, \dots, 6). \quad (77.23)$$

Tensorul de rangul patru, K , se numește *tensorul coeficienților Kerr*; simetria lui internă este aceeași ca și simetria internă a tensorului coeficienților piezooptici, π ; mai mult decît atît, în cazul acestor tensori, coincid și regulile de retranscriere în noile notații

$$K_{\lambda\mu} = \begin{cases} K_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2K_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6) \end{cases} \quad (77.24)$$

(de comparat cu (77.5)). De aceea, forma generală a tensorului coeficienților Kerr, într-un sistem de coordonate cristalofizic, este dată pentru cristalele tuturor claselor de același tabel, E.19, ca și forma generală a tensorului coeficienților piezooptici.

Efectul electrooptic pătratic se poate observa și la cristalele în care se manifestă efectul electrooptic liniar. În majoritatea cazurilor el contribuie doar cu mici adausuri la efectul liniar, principal; dacă însă cîmpul electric este aplicat experimental

după o direcție, astfel încît nu determină apariția unui efect electrooptic liniar, atunci efectul electrooptic pătratic devine determinant.

§ 78. ANIZOTROPIA OPTICĂ ARTIFICIALĂ A CRISTALELOR

Cristale uniaxe și cristale biaxe artificiale. Să examinăm modul în care, sub influența acțiunilor exterioare, se modifică indicatricea optică; cu alte cuvinte, cum se schimbă proprietățile optice ale cristalului ca un întreg.

Mediile optice izotrope — cristalele sistemului cubic și corpurile izotrope — pot ca în urma unor acțiuni exterioare să rămîină optice izotrope, dar pot și să devină asemenea cristalelor uniaxe sau biaxe, ceea ce se vede imediat din figura conosopică (v. § 40). Primul caz se realizează ca rezultat al unei presiuni exterioare din toate direcțiile, p . În acest caz tensorul ζ este izotrop.

Cînd acțiunea exterioară transformă mediul optic izotrop în analogul unui cristal uniax, simetria tensorului ζ este egală cu ∞/mm ; pentru aceasta, mediul deformat trebuie să-și păstreze o axă de simetrie de ordinul trei sau de un ordin mai înalt. Înseamnă că pentru a se atribui unui mediu izotrop anizotropia optică a unui cristal uniax este suficient ca acest cristal să fie supus acțiunii unui cîmp electric orientat arbitrar sau unei tensiuni uniaxe. Într-un cristal dintr-un subsistem superior din sistemul cubic, cîmpul electric sau tensiunea uniaxă trebuie orientate după una dintre axele de ordinul trei sau de ordinul patru, adică după direcțiile $\langle 111 \rangle$ sau $\langle 100 \rangle$, iar într-un cristal dintr-un subsistem inferior sistemului cubic, după axa de ordinul trei, $\langle 111 \rangle$.

Tensiunile mecanice care nu se reduc la o comprimare hidrostatică sau la o tensiune uniaxă, acționînd asupra unui corp izotrop îl transformă din punct de vedere al proprietăților optice în analogul unui cristal uniax. În cristalele din sistemul cubic același efect îl are și întinderea uniaxă sau cîmpul electric, orientate după o direcție diferită de direcțiile axelor de ordinul trei sau de ordinul patru.

Să examinăm, de exemplu, modificarea proprietăților optice ale unui cristal dintr-un subsistem inferior al sistemului cubic, sub acțiunea unei tensiuni uniaxe de intensitate σ , orientată după $[001]$ — la aceste cristale, $[001]$ este axă de ordinul doi. Corecția la tensorul impermeabilității dielectrice este egală cu

$$\zeta = \pi : \sigma e_3 e_3 = (\pi_{21} e_1 e_1 + \pi_{12} e_2 e_2 + \pi_{11} e_3 e_3) \sigma, \quad (78.1)$$

unde e_1, e_2, e_3 sînt versorii sistemului de coordonate cristalofizic. Axele principale ale tensorului variabil al impermeabilității dielectrice coincid cu acești versori. Pentru analiza pe care o întreprindem este util să stabilim care anume dintre indicii de refracție principali este cel mai mare și care este cel mai mic. Astfel, în cazul alunurilor de potasiu, azotatului de bariu și azotatului de plumb,

$$\pi_{11} < \pi_{21} < \pi_{12};$$

de aceea,

$$\begin{aligned} N_g^{-2} &= N_3^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{11}\sigma, \\ N_m^{-2} &= N_1^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{21}\sigma, \\ N_p^{-2} &= N_2^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{12}\sigma. \end{aligned} \quad (78.2)$$

Așadar, axele optice ale cristalului tensionat se află în planul (100), fiecare dintre ele făcînd cu axa [001] un unghi V , care este dat de formula

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{N_p^{-2} - N_m^{-2}}{N_m^{-2} - N_g^{-2}}}.$$

(v. § 35). Înlocuind în această formulă inversele pătratelor indicilor de refracție principali, găsim

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{\pi_{12} - \pi_{21}}{\pi_{21} - \pi_{11}}}. \quad (78.3)$$

În ciuda faptului că indicii principali depind de intensitatea acțiunii exterioare, unghiul dintre axele optice nu depinde de ea; el este determinat de caracterul și orientarea acțiunii și de proprietățile piezooptice (sau, respectiv, electrooptice) ale cristalului.

Să analizăm acum cristalele uniaxe. Ele rămîn uniaxe atît într-un câmp electric orientat după axa principală de simetrie, cît și sub acțiunea unei întinderi uniaxe de aceeași direcție și a comprimării hidrostatice. Oricare alte solicitări transformă aceste cristale în analoagele cristalelor biaxe.

Pentru a evalua birefringența artificială, vom evalua jumătate din unghiul dintre axele optice ale cristalului tensionat. Să utilizăm pentru aceasta rezultatele obținute în § 20. Anume, vom presupune că tensorul mic ζ (în comparație cu η) este scris într-un sistem de coordonate cristalofizic. Să notăm cu $\xi_{(1)}$ și cu $\xi_{(2)}$ ($\xi_{(1)} > \xi_{(2)}$) valorile proprii ale tensorului bidimensional

$$\begin{vmatrix} \zeta_{11} & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} \end{vmatrix}.$$

Presupunînd, pentru fixarea ideilor, că cristalul tensionat este optic pozitiv, avem

$$\begin{aligned} N_o^{-2} &= N_e^{-2} + \zeta_{33}, \\ N_m^{-2} &= N_o^{-2} + \xi_{(2)}, \\ N_p^{-2} &= N_o^{-2} + \xi_{(1)}. \end{aligned} \quad (78.4)$$

Atunci jumătatea unghiului dintre axele optice este

$$V \approx \operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{\xi_{(1)} - \xi_{(2)}}{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}. \quad (78.5)$$

Prin urmare, cristalul rămîne pozitiv și cînd este solicitat ($V \ll 45^\circ$). Substituind în formula (78.5) valoarea diferenței $\xi_{(1)} - \xi_{(2)}$, obținem

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt{(\zeta_{11} - \zeta_{22})^2 + (2\zeta_{12})^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}. \quad (78.6)$$

Dacă birefringența artificială este provocată de efectul piezooptic atunci

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt{[(\pi_{1\mu} - \pi_{2\mu}) \sigma_\mu]^2 + (2\pi_{6\mu} \sigma_\mu)^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}, \quad (78.7)$$

iar dacă este creată de efectul electrooptic, atunci

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt{[(r_{1k} - r_{2k}) q_k]^2 + (2r_{6k} q_k)^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}, \quad (78.8)$$

unde $\mathbf{E} = E\mathbf{q}$ este intensitatea cîmpului electric. Sînt ușor de scris formulele analoage și pentru cristalele negative.

Să vedem care sînt deosebirile dintre birefringența artificială în cristalele uniace și birefringența artificială în cristalele optic izotrope. În cristalele uniace unghiul dintre axele optice este mic și depinde de intensitatea solicitării; astfel, în cazul efectului piezooptic el este proporțional cu $\sqrt{\sigma}$, în cazul efectului electrooptic, cu \sqrt{E} , iar în cazul efectului Kerr, cu $|E|$. În cristalele

optic izotrope acest unghi nu este, în general, mic și nici nu depinde de intensitatea solicitărilor. Pe măsura micșorării treptate a solicitării aplicate unui cristal cubic, ieșirile axelor optice în figura conosopică nu se deplasează, însă toate izocromele se lărgesc treptat și ies din câmpul vizual. Dimpotrivă, în cazul micșorării solicitării aplicate unui cristal uniax, ieșirile axelor optice din figura conosopică se apropie la început mai încet, iar apoi din ce în ce mai repede, pînă la contopirea totală, pe cînd numărul izocromelor care formează figura conosopică practic nu se modifică, deoarece, în acest caz, el este determinat de dubla refracție naturală a cristalului. Prin urmare, unghiul dintre axele optice, în cazul birefringenței artificiale, caracterizează intensitatea solicitării numai pentru cristalele uniace.

Dubla refracție artificială este provocată, în particular, și de tensiunile interioare, care iau naștere în cristale în procesul de creștere.

Birefringența artificială. Se numește birefringență artificială modificarea birefringenței cristalelor sub acțiunea solicitărilor exterioare, de pildă, a tensiunilor mecanice sau a cîmpului electric, în particular apariția dublei refracții în cristale sau după direcții în care aceasta nu exista în absența acțiunilor exterioare.

Fie direcția de propagare a luminii astfel încît în absența unui cîmp electric sau a tensiunilor mecanice birefringența să lipsească (în cristalele din categoriile inferioară și medie o asemenea proprietate au axele optice, iar în cristalele din categoria superioară și în corpurile izotrope orice direcție). Sub acțiunea cîmpului electric sau a tensiunilor mecanice va apărea după această direcție o dublă refracție artificială. Să calculăm mărimea ei, avînd în vedere că creșterea ζ a tensorului impermitivității dielectrice, η , datorită solicitărilor exterioare, este mică.

Să introducem un sistem de coordonate cartezian special, $X'_1 X'_2 X'_3$, orientînd axa X'_3 după normala la undă; atunci axele X'_1 și X'_2 se vor afla în planul frontului de undă. Secțiunea centrală cu planul frontului de undă a indicatricei optice este dată în sistemul de coordonate special de ecuațiile

$$\eta'_{\alpha\beta} x'_\alpha x'_\beta = 1 \quad (\alpha, \beta = 1, 2), \quad x'_3 = 0, \quad (78.9)$$

care reprezintă un cerc de rază n_o , n_o fiind indicele de refracție a luminii cînd se propagă după axa optică în cristalul liber. Într-adevăr, axa X'_3 coincide cu axa optică și deci

$$\eta'_{11} = \eta'_{22} = n_o^{-2}, \quad \eta'_{12} = 0, \quad (78.10)$$

astfel încît prima dintre ecuațiile (78.9) se reduce la

$$n_o^{-2}[(x'_1)^2 + (x'_2)^2] = 1.$$

Indicatricea optică perturbată este descrisă de ecuația

$$r(\eta + \zeta) \cdot r = 1, (\eta_{ij} + \zeta_{ij})x_i x_j = 1, \quad (78.11)$$

pe cînd secțiunea sa centrală cu planul frontului de undă, de ecuațiile

$$(\eta'_{\alpha\beta} + \zeta'_{\alpha\beta})x'_\alpha x'_\beta = 1 \quad (\alpha, \beta = 1, 2), \quad x_3 = 0. \quad (78.12)$$

Ținînd cont de relația (78.10), vom scrie prima dintre ecuațiile (78.12) sub forma

$$(n_o^{-2} + \zeta'_{11})(x'_1)^2 + (n_o^{-2} + \zeta'_{22})(x'_2)^2 + 2\zeta'_{12}x'_1 x'_2 = 1.$$

Indicii de refracție n_1 și n_2 ai undelor liniar polarizate, care se propagă prin cristalul tensionat, se calculează din ecuația pătratică în n^{-2}

$$\begin{vmatrix} \eta_o^{-2} + \zeta'_{11} - n^{-2} & \zeta'_{12} \\ \zeta'_{12} & n_o^{-2} + \zeta'_{22} - n^{-2} \end{vmatrix} = 0. \quad (78.13)$$

Rezolvînd-o obținem

$$n_{1,2}^{-2} = n_o^{-2} + \frac{1}{2} [(\zeta'_{11} + \zeta'_{22}) \pm \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}].$$

Ținînd cont că $|\zeta'_{ij}| \ll 1$, pe baza regulilor de calculul aproximațiilor, obținem indicii de refracție

$$n_{1,2} = n_o \left\{ 1 - \frac{1}{4} n_o^2 [(\zeta'_{11} + \zeta'_{22}) \pm \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}] \right\}. \quad (78.14)$$

Prin definiție, birefringența, Δ , este egală cu valoarea absolută a diferenței dintre acești indici de refracție, adică

$$\Delta = \frac{1}{2} n_o^3 \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}. \quad (78.15)$$

Aceasta este tocmai mărimea căutată a birefringenței artificiale pentru cazul în care direcția de propagare a luminii coincide cu axa optică a cristalului netensionat.

Vectorul inducției, $\mathbf{D}^{(1)}$, al unde cu indicele de refracție n_1 , se află în planul frontului de undă, făcând unghiul φ cu axa X'_1 , astfel încît

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{2\zeta'_{12}}{\zeta'_{11} - \zeta'_{22} + \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}}. \quad (78.16)$$

Vectorul $\mathbf{D}^{(2)}$ se află, de asemenea, în planul frontului de undă și este perpendicular pe vectorul $\mathbf{D}^{(1)}$.

Dacă se ia de la bun început sistemul de coordonate special astfel încît $\zeta'_{12} = 0$ (uneori aceasta se reușește plecîndu-se de la considerații de simetrie), atunci birefringența devine

$$\Delta = \frac{1}{2} n_0^3 |\zeta'_{11} - \zeta'_{22}|, \quad (78.17)$$

iar direcțiile de vibrație coincid cu axele X'_1 și X'_2 .

Dacă direcția de propagare a luminii nu coincide cu axa optică a cristalului liber, birefringența cristalului este compusă din dubla refracție naturală, proprie și cristalului liber, și din cea artificială, determinată de solicitările exterioare. Cînd direcția de propagare a luminii face cu axa optică a cristalului liber un unghi suficient de mare, birefringența artificială reprezintă, de obicei, numai o mică creștere a celei naturale, încît se pot utiliza regulile calculului aproximațiilor. Tocmai acest caz îl vom studia.

Să introducem un sistem de coordonate cartezian special, $X'_1 X'_2 X'_3$, astfel încît axa X'_3 să se suprapună cu direcția de propagare a luminii, iar axele X'_1 și X'_2 cu direcțiile de vibrație (mai exact, cu direcțiile vectorilor \mathbf{D}) ale undelor plan polarizate, care se propagă după o direcție dată în cristalul liber. Vom nota indicii de refracție ai acestor unde cu n_{01} și, respectiv, cu n_{02} . Ecuația secțiunii centrale cu planul frontului de undă în sistemul de coordonate special, a indicatricii optice a cristalului liber, are forma

$$\left(\frac{x'_1}{n_{01}}\right)^2 + \left(\frac{x'_2}{n_{02}}\right)^2 = 1, \quad x'_3 = 0. \quad (78.18)$$

Exact la fel cum indicatricea optică servește drept suprafață caracteristică a tensorului tridimensional al impermitivității dielectrice, secțiunea ei centrală cu planul frontului de undă servește drept caracteristică acurbei tensorului bidimensional — a proiecției tensorului impermitivității dielectrice pe acest plan. Pentru cristalul liber, componentele acestui tensor în sistemul de coordonate special sînt egale cu

$$\begin{vmatrix} n_{01}^{-2} & 0 \\ 0 & n_{02}^{-2} \end{vmatrix}.$$

În cazul în care cristalul este supus acțiunii unui câmp electric sau unor tensiuni mecanice, la acest tensor se adaugă tensorul mic, bidimensional

$$\begin{vmatrix} \zeta'_{11} & \zeta'_{12} \\ \zeta'_{12} & \zeta'_{22} \end{vmatrix},$$

în care $\zeta'_{\alpha\beta}$ sînt componentele tensorului ζ , examinat în § 77, în sistemul de coordonate special.

În § 20 s-a arătat cum variază valorile proprii și vectorii proprii ai unui tensor simetric de rangul doi în cazul unor variații mici ale componentelor acestuia. Ținînd cont de relația dintre valorile proprii ale unui tensor bidimensional și indicii de refracție, găsim, cu ajutorul relației (20.9) inversele pătratelor indicilor de refracție

$$n_1^{-2} = n_{01}^{-2} + \zeta'_{11}, \quad (78.19)$$

$$n_2^{-2} = n_{02}^{-2} + \zeta'_{22}$$

și unghiul mic de rotație a vectorului inducției, \mathbf{D} , al undelor luminoase

$$\varphi = \omega_{12} = \frac{\zeta'_{12}}{n_{01}^{-2} - n_{02}^{-2}}. \quad (78.20)$$

Valoarea pozitivă a acestui unghi corespunde rotației în jurul axei X'_3 dinspre capătul pozitiv al axei X'_1 spre capătul pozitiv al axei X'_2 , iar valoarea negativă — rotației în jurul aceleiași axe, însă în sens invers. Din (78.19), utilizînd regulile calculului aproximațiilor, găsim

$$n_1 = n_{01} - \frac{1}{2} n_{01}^3 \zeta'_{11}, \quad (78.21)$$

$$n_2 = n_{02} - \frac{1}{2} n_{02}^3 \zeta'_{22}.$$

Prin urmare, birefringența Δ , a unui cristal sub influența solicitărilor exterioare variază cu cantitatea

$$\Delta_{\text{artific}} = \frac{1}{2} |n_{01}^3 \zeta'_{11} - n_{02}^3 \zeta'_{22}|. \quad (78.22)$$

În această situație, micile variații ale birefringenței trebuie determinate pe fondul birefringenței proprii a cristalului, așa că aceste măsurători sînt mult mai dificile decît în cazul propagării luminii după axa optică.

Cînd folosim formulele (78.14) — (78.17) și (78.20) — (78.22) trebuie să reținem că ele sînt valabile numai în sistemul de coordonate special, care nu coincide, în general, cu sistemul de coor-

donate cristalofizic. Pentru a evita calculele componentelor tensorilor de rangul trei și de rangul patru în sistemul de coordonate special, care sînt foarte laborioase, este indicat ca efectuarea calculelor să se facă după următoarea schemă:

1) se calculează componentele vectorului intensitate a cîmpului electric sau ale tensorului tensiunilor într-un sistem de coordonate cristalofizic;

2) utilizînd valorile tabelate ale tensorilor coeficienților electrooptici sau piezooptici, se determină, cu ajutorul relațiilor (77.3), (77.17) și (77.22), componentele tensorului ζ în sistemul de coordonate cristalofizic;

3) se calculează componentele tensorului ζ în sistemul de coordonate special;

4) înlocuind componentele tensorului ζ în formulele (78.14) — (78.17) sau (78.20) — (78.22), se calculează mărimea birefringenței artificiale și se determină direcțiile de vibrație.

Să examinăm unele particularități ale dublei refracții artificiale în cristalele sistemului cubic și în corpurile izotrope. În acest caz expresia (78.15) determină mărimea birefringenței artificiale pentru orice direcție de propagare a luminii. Tensorul ζ intră în această formulă numai sub formă de combinație a componentelor $\zeta'_{11} - \zeta'_{22}$ și a componentei ζ'_{12} . Rezultă deci că mărimea birefringenței artificiale în corpurile optic izotrope este influențată nu de partea sferică, ci numai de deviatorul tensorului ζ ; componentele lui sînt

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \zeta_{ij} - \frac{1}{3} \zeta_{kk} \delta_{ij}.$$

Deoarece tensorul ζ este definit prin tensorii coeficienților Kerr, tensorii coeficienților electrooptici și piezooptici, va fi deci necesar să se evalueze măsura în care componentele acestor tensori afectează mărimea birefringenței artificiale și dacă este posibil să se calculeze componentele lor din datele măsurărilor de birefringență artificială.

Să începem cu studiul coeficienților electrooptici. Dintre corpurile optic izotrope numai cristalele claselor $\bar{4}3m$ și 23 au coeficienții electrooptici diferiți de zero, $r_{41} = r_{52} = r_{63}$; ceilalți coeficienți electrooptici ai acestor cristale sînt egali cu zero. În cazul efectului electrooptic,

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \tilde{r}_{ijk} E_k$$

unde

$$\tilde{r}_{ijk} = r_{ijk} - \frac{1}{3} r_{llk} \delta_{ij}, \quad (78.23)$$

sau, în scriere contrasă,

$$\tilde{r}_{\lambda k} = \begin{cases} r_{\lambda k} - \frac{1}{3}(r_{1k} + r_{2k} + r_{3k}) & (\lambda = 1, 2, 3), \\ r_{\lambda k} & (\lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (78.24)$$

Dacă înlocuim în (78.24) coeficienții electrooptici diferiți de zero, ne convingem că pentru cristalele sistemului cubic $\tilde{r}_{\lambda k} = r_{\lambda k}$ astfel încât măsurând birefringența artificială se poate determina unicul coeficient electrooptic independent al acestor cristale.

Cu totul altfel stau lucrurile în cazul determinării coeficienților piezooptici și coeficienților Kerr din măsurători ale birefringenței artificiale. Să considerăm, pentru precizarea lucrurilor, coeficienții piezooptici; în acest caz,

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \tilde{\pi}_{ijkl} \sigma_{kl},$$

unde

$$\tilde{\pi}_{ijkl} = \pi_{ijkl} - \frac{1}{3} \pi_{mmkl} \delta_{ij}. \quad (78.25)$$

În scrierea contrasă

$$\tilde{\pi}_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{\lambda\mu} - \frac{1}{3}(\pi_{1\mu} + \pi_{2\mu} + \pi_{3\mu}) & (\lambda = 1, 2, 3), \\ \pi_{\lambda\mu} & (\lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (78.26)$$

Pentru subsistemul inferior al sistemului cubic,

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_{11} &= \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) + \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi}_{12} &= -\frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) + \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi}_{21} &= \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) - \frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi} &= \pi_{44}. \end{aligned} \quad (78.27)$$

Rezultă deci că oricare ar fi direcțiile în care s-ar măsura birefringența artificială, din aceste măsurători se pot determina numai trei combinații independente de coeficienți piezooptici: $\pi_{11} - \pi_{12}$, $\pi_{11} - \pi_{21}$ și π_{44} ; totodată, pentru calculul dublei refracții artifi-

ciale, determinată de efectul piezooptic, acest set de combinații este complet suficient. Valorile individuale ale coeficienților π_{11} , π_{12} și π_{21} sînt necesare pentru calculul variațiilor absolute ale indicilor de refracție și se pot calcula din rezultatele măsurărilor respective. Aceste măsurători sînt însă mult mai dificile decît măsurătorile de birefrință, deoarece pentru ele sînt deja necesare nu metodele de polarizare, ci metodele interferențiale.

Pentru cristalele subsistemului superior al sistemului cubic, $\pi_{21} = \pi_{12}$. Înlocuind această egalitate în formulele (78.27), găsim

$$\begin{aligned}\tilde{\pi}_{11} &= \frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}), \\ \tilde{\pi}_{12} &= -\frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}), \\ \tilde{\pi}_{44} &= \pi_{44}.\end{aligned}\quad (78.28)$$

Prin urmare, în acest caz, măsurătorile birefrinței artificiale permit determinarea numai a diferenței $\pi_{11} - \pi_{12}$ precum și a coeficientului π_{44} .

În fine, pentru corpurile izotrope, $\pi_{44} = \pi_{11} - \pi_{12}$, această diferență definind complet birefrința artificială, determinată de efectul piezooptic în corpurile izotrope.

Efectul piezooptic în corpurile izotrope transparente se utilizează pe larg pentru ca, plecînd de la figura de interferență, care apare datorită dublei refracții artificiale, provocată de cîmpul neomogen de tensiuni, să se reconstituie cîmpul tensiunilor care i-a dat naștere. Aceste aplicații se pot cunoaște apelînd, de exemplu, la cărțile: Koker și Failon (1939); Diurelli și Raili (1970); Föppl și Menx (1966).

Asupra efectului electrooptic și aplicațiilor sale se pot consulta lucrările Jeludev (1968, 1969); Mustel și Parîghin (1970); Sonin și Vasilevskaja (1971).

§ 79. POLARIZAREA NELINIARĂ ÎN CAZUL PROPAGĂRII UNOR UNDE ELECTROMAGNETICE DE INTENSITATE MARE

Polarizarea unui dielectric anizotrop în cîmpuri armonice intense este constituită din partea liniară, $P^{(1)}$, și din corecțiile pătratică, $P^{(2)}$, și cubice, $P^{(3)}$, etc.

$$P = P^{(1)} + P^{(2)} + P^{(3)} + \dots \quad (79.1)$$

Ținând cont că polarizabilitatea depinde de frecvență, vom indica frecvențele componentelor armonice ale câmpului electric și ale polarizării. Formal se poate scrie

$$\begin{aligned} P_i^{(1)}(\omega_1) &= \alpha_{ij}(\omega_1, \omega_2) E_j(\omega_2), \\ P_i^{(2)}(\omega_1) &= \chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) E_j(\omega_2) E_k(\omega_3), \\ P_i^{(3)}(\omega_1) &= \theta_{ijkl}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) E_j(\omega_2) E_k(\omega_3) E_l(\omega_4). \end{aligned} \quad (79.2)$$

Tensorii α , χ , θ se numesc, respectiv, tensorul susceptibilității liniare, tensorul susceptibilității pătratică și tensorul susceptibilității cubice. Tensorul $\alpha(\omega_1, \omega_2)$ dă mărimea și direcția părții liniare a polarizării avînd frecvența ω_1 , care ia naștere sub acțiunea unui câmp electric de frecvență ω_2 ; tensorul $\chi(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ exprimă corecția pătratică a polarizării avînd frecvența ω_1 , determinată de interacțiunea în cristal a două câmpuri electrice armonice, unul de frecvență ω_2 și celălalt de frecvență ω_3 .

Vom prezenta, fără demonstrație, o importantă proprietate a tensorilor susceptibilității (demonstrația se poate găsi, de pildă, în cărțile de la sfîrșitul § 80). În general, acești tensori nu au nici un fel de simetrie internă și totuși componentele tensorilor nu se modifică dacă concomitent cu permutarea indicilor se face și permutarea corespunzătoare a frecvențelor

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}(\omega_1, \omega_2) &= \alpha_{ji}(\omega_2, \omega_1), \\ \chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) &= \chi_{ikj}(\omega_1, \omega_3, \omega_2) = \chi_{jki}(\omega_2, \omega_1, \omega_3) = \dots, \\ \theta_{ijkl}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) &= \theta_{jikl}(\omega_2, \omega_1, \omega_3, \omega_4) = \\ &= \theta_{kjil}(\omega_3, \omega_2, \omega_1, \omega_4) = \dots \end{aligned} \quad (79.3)$$

Relațiile ce se obțin prin permutări ce nu afectează primul indice și prima frecvență corespunzătoare sînt banale: este evident că câmpurile $E_j(\omega_2)$, $E_k(\omega_3)$, $E_l(\omega_4)$ pot fi introduse în formula (79.2) în orice ordine. Au sens fizic și necesită demonstrație numai formulele care se obțin prin permutări în care iau parte primul indice și prima frecvență, de exemplu,

$$\chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \chi_{ikj}(\omega_2, \omega_1, \omega_3).$$

Dacă toate frecvențele sînt diferite, aceste relații leagă componentele diversilor tensori și de aceea nu reprezintă o confirmare a

existenței unei simetrii interne. Ei definesc simetria internă a tensorilor numai în cazul coincidenței frecvențelor. De pildă, relația

$$\chi_{ijk} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \chi_{ikj}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$$

leagă între ele componentele aceluiași tensor și arată că el este simetric în raport cu ultimii doi indici, adică are simetria internă $V[V^2]$.

Pentru a formula cât mai clar relațiile (79.3) am scris frecvențele $\omega_1, \dots, \omega_4$ formal, fără să ne punem problema în ce măsură ele sînt independente. În realitate, frecvența de polarizare este legată de frecvențele cîmpului. Dacă polarizarea depinde liniar de intensitatea cîmpului, atunci, evident, frecvențele lor coincid. Rezultă deci că tensorul susceptibilității liniare, $\alpha(\omega_1, \omega_2)$, este diferit de zero numai pentru $\omega_1 = \omega_2$, astfel încît el poate fi scris sub forma $\alpha(\omega)$; este clar că el este simetric.

Să deducem relațiile de frecvențe pentru tensorul susceptibilității pătratic, $\chi(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$. În orice punct fixat al cristalului, cîmpurile $E(\omega_2)$ și $E(\omega_3)$ depind de timp după legea

$$\begin{aligned} E_j(\omega_2) &= A_j \cos \omega_2 t, \\ E_k(\omega_3) &= B_k \cos (\omega_3 t + \varphi), \end{aligned}$$

în care φ este diferența de fază dintre aceste cîmpuri în punctul considerat. Deoarece

$$E_j(\omega_2) E_k(\omega_3) = \frac{1}{2} A_j B_k \{ \cos[(\omega_2 - \omega_3)t - \varphi] + \cos[(\omega_2 + \omega_3)t + \varphi] \},$$

rezultă că polarizarea, care depinde pătratic de cîmp, are fie frecvența diferență $(\omega_2 - \omega_3)$, fie frecvența sumă $(\omega_2 + \omega_3)$. Cu alte cuvinte, tensorul $\chi(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ este diferit de zero numai în două cazuri

$$\chi = \chi(\omega_2 - \omega_3, \omega_2, \omega_3), \quad (79.4)$$

$$\chi = \chi(\omega_2 + \omega_3, \omega_2, \omega_3).$$

Dacă prin cristal se trimite numai o radiație monocromatică de frecvență ω , suficient de intensă pentru ca în afară de polarizarea liniară să apară și polarizarea pătratică, atunci $\omega_2 = \omega_3 = \omega$, iar expresia (79.4) se transformă în

$$\begin{aligned} \chi &= \chi(0, \omega, \omega), \\ \chi &= \chi(2\omega, \omega, \omega). \end{aligned} \quad (79.5)$$



Așadar, efectele pătratică duc, în acest caz, la apariția unei componente constante și a unei armonice de ordinul doi.

Același tensor, $\chi(0, \omega, \omega)$, care definește componenta constantă în cazul polarizării pătratică, caracterizează și efectul electrooptic. Într-adevăr, dacă se ține cont de polarizarea pătratică, vectorul inducție al undei luminoase de frecvență ω într-un cristal care se află în câmpul electrostatic $E(0)$ este egal cu

$$D_i(\omega) = E_i(\omega) + 4\pi P_i(\omega) = E_i(\omega) + 4\pi P_i^{(1)}(\omega) + 4\pi P_i^{(2)}(\omega).$$

Notînd

$$\kappa_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + 4\pi\alpha_{ij}(\omega),$$

se poate scrie

$$D_i(\omega) = \kappa_{ij}(\omega)E_j(\omega) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)E_k(0)E_j(\omega).$$

Tensorii permitivității dielectrice, $\kappa(\omega)$, și al impermitivității dielectrice, $\eta(\omega)$, sînt reciproc inversi, atît în absența câmpului electric, $E(0)$, cît și în prezența lui

$$\kappa_{ij}(\omega)\eta_{jm}(\omega) = \delta_{im},$$

$$[\kappa_{ij}(\omega) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)E_k(0)][\eta_{jm}(\omega) + r_{jmk}(\omega)E_k(0)] = \delta_{im}.$$

Cu o precizie de pînă la infiniti mici de ordinul doi, aceasta dă

$$\kappa_{ij}(\omega)r_{jmk}(\omega)E_k(0) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)E_k(0)\eta_{jm}(\omega) = 0,$$

de unde se pot obține fără nici o dificultate formulele care leagă tensorii efectului electrooptic de tensorul susceptibilității pătratică

$$r_{lmk}(\omega) = -4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)\eta_{il}(\omega)\eta_{jm}(\omega) = 0, \quad (79.6)$$

$$\chi_{kij}(0, \omega, \omega) = -\frac{1}{4\pi}\kappa_{il}(\omega)\kappa_{jm}(\omega)r_{lmk}(\omega).$$

Relațiile dintre frecvențe, pentru susceptibilitatea dielectrică cubică duc la faptul că tensorul $\theta(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$ este diferit de zero numai pentru frecvențele

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \omega_2 + \omega_3 - \omega_4, & \omega_1 &= \omega_2 - \omega_3 + \omega_4 \\ \omega_1 &= -\omega_2 + \omega_3 + \omega_4, & \omega_1 &= \omega_2 + \omega_3 + \omega_4. \end{aligned} \quad (79.7)$$

În particular, tensorul $\theta(3\omega, \omega, \omega, \omega)$ descrie generarea armonice de ordinul trei, tensorul $\theta(0, 0, \omega, \omega)$ efectul Kerr, tensorul $\theta(2\omega, 0, \omega, \omega)$, generarea armonice de ordinul doi pe seama polarizării cubice cu ajutorul unui câmp electrostatic suficient de intens.

Polarizarea pătratică se exprimă prin tensorii de rangul trei. Prin urmare, ea este posibilă numai în cristalele care au centru de simetrie. În particular, generarea armonice de ordinul doi și efectul electrooptic sunt descrise de tensori cu simetria internă $V[V^2]$, a căror formă generală coincide, evident, cu forma tensorilor coeficienților piezoelectricei. Valorile lor pentru unele cristale sunt date în tabelul 79.1.

Tabelul 79.1

Coeficienții susceptibilității pătratice, $\chi_{k\mu}(2\omega, \omega, \omega)$ ai unor cristale, în 10^{-8} unit. CGSes; lungimea de undă, λ , corespunde frecvenței

Cristalul	Clasa	λ , nm	Indicii $k\mu$					
			14	15	22	31	33	36
GaAs	$\bar{4}3m$	694	294					
		1 060	348					
InSb	$\bar{4}3m$	694	204					
		1 060	460					
GaP	$\bar{4}3m$	1 060	780					
ZnS	$\bar{4}3m$	10 600	7,3					
ZnS	6mm	10 600		10,5		4,5	8,9	
LiNbO ₃	3m	1 060			3,8	6,1	49,8	
LiTaO ₃	3m	1 060			2,5	1,6	24	
KDP	$\bar{4}2m$	694	0,59					0,62
ADP	$\bar{4}2m$	694						0,56

Efectele de polarizare cubică se caracterizează, dimpotrivă, prin tensori de rangul patru și, prin urmare, sunt posibile în mediile cu orice simetrie. În particular, generarea unei armonice de ordinul trei este descrisă de un tensor cu simetria internă $V[V^3]$, efectul Kerr, de un tensor de simetrie internă $[V^2]^2$, iar generarea armonice de ordinul doi cu ajutorul câmpului electrostatic, de către tensorul $V^2[V^2]$. Forma generală a acestor tensori, pentru toate subsistemele, este dată în tabelele E.16, E.17, E.19, E.21 și E.22.

§ 80. GENERAREA ARMONICELOR LUMINOASE. DIRECȚIILE DE SINCRONISM

Cînd printr-un cristal transparent, care are tensorul coeficienților susceptibilității dielectrice pătratice diferit de zero, se

propagă o undă luminoasă monocromatică, cu intensitățile câmpului electric $E(\omega_2)$ și $E(\omega_3)$, în cristal apare polarizarea electrică pătratică având frecvența egală cu suma frecvențelor celor două câmpuri electrice

$$P^{(2)}(\omega_2 + \omega_3) = \chi(\omega_2 + \omega_3, \omega_2, \omega_3) : E(\omega_2) E(\omega_3). \quad (80.1)$$

Această polarizare poate servi ca sursă de unde luminoase cu frecvența sumă. Generarea efectivă a unei asemenea unde precum și direcția ei de propagare depind de condițiile de interferență: polarizarea pătratică ce ia naștere într-un punct dat al cristalului trebuie să amplifice unda de frecvență sumă, care trece prin acest punct. Condițiile ca interferența să fie constructivă se obțin cel mai simplu interpretând generarea undei de frecvență sumă ca pe o reacție între fotoni

$$\Phi(\omega_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{d}_2) + \Phi(\omega_3, \mathbf{k}_3, \mathbf{d}_3) = \Phi(\omega_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{d}_1); \quad (80.2)$$

aici \mathbf{k} este vectorul de undă al fotonului respectiv, iar \mathbf{d} vectorul unitar al direcției de vibrație. În cadrul reacției trebuie să se conserve energia

$$\hbar\omega_2 = \hbar\omega_3 = \hbar\omega_1 \quad (80.3)$$

și impulsul

$$\hbar\mathbf{k}_2 + \hbar\mathbf{k}_3 = \hbar\mathbf{k}_1. \quad (80.4)$$

Legea de conservare a energiei confirmă faptul că unda rezultantă are frecvența sumă. Din legea de conservare a impulsului rezultă însă că și vectorul său de undă este suma vectorilor de undă a celor două câmpuri electrice

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3. \quad (80.5)$$

Deoarece

$$\mathbf{k} = \frac{\omega n(\omega, \mathbf{d})}{c} \mathbf{m},$$

unde \mathbf{m} este vectorul unitar al normalei undei, $n = n(\omega, \mathbf{d})$ este indicele de refracție, iar c viteza luminii în vid. Expresia (80.5) poate fi transcrisă sub forma

$$(\omega_2 + \omega_3)n(\omega_2 + \omega_3, \mathbf{d}_1)\mathbf{m}_1 = \omega_2 n(\omega_2, \mathbf{d}_2)\mathbf{m}_2 + \omega_3 n(\omega_3, \mathbf{d}_3)\mathbf{m}_3. \quad (80.6)$$

Aceasta este tocmai condiția ca interferența să fie constructivă, necesară pentru generarea undei de frecvență sumă și de intensitate mare.

Condiția de generare a armonice de ordinul doi este un caz particular al relației (80.6), când $\omega_2 = \omega_3 = \omega$

$$n(2\omega, \mathbf{d}_1) m_1 = \frac{1}{2} [n(\omega, \mathbf{d}_2) m_2 + n(\omega, \mathbf{d}_3) m_3]. \quad (80.7)$$

Dacă pentru undele cu frecvența fundamentală coincid și direcțiile de vibrație ($\mathbf{d}_2 = \mathbf{d}_3 = \mathbf{d}$), această condiție se simplifică și mai mult

$$n(2\omega, \mathbf{d}_1) m_1 = n(\omega, \mathbf{d}) \frac{m_2 + m_3}{2}; \quad (80.8)$$

vectorul de undă al armonice de ordinul doi se află, în acest caz, exact la mijloc, între vectorii de undă ai undelor cu frecvența fundamentală.

În fine, condiția ca armonica de ordinul doi să fie generată de o undă cu frecvența fundamentală se obține de aici, pentru $m_2 = m_3 = m$

$$n(2\omega, \mathbf{d}_1) m_1 = n(\omega, \mathbf{d}) m. \quad (80.9)$$

Evident, în acest caz, $m_1 = m$, adică direcția de propagare a undei armonice de ordinul doi coincide cu direcția de propagare a undei avînd frecvența fundamentală.

Condițiile de interferență constructivă, (80.7), (80.8) și (80.9), necesare pentru generarea undei armonice de ordinul doi suficient de intense, sînt satisfăcute numai de un număr restrîns de direcții; ele se numesc *direcții de sincronism*. În corpurile optic izotrope, de pildă, de cele mai multe ori asemenea direcții nu există deloc. Într-adevăr, pentru corpurile optic izotrope condițiile (80.7) și (80.8) se reduc la

$$n(2\omega) m_1 = n(\omega) \frac{m_2 + m_3}{2}. \quad (80.10)$$

Pentru ca condiția (80.10) să fie satisfăcută este necesar ca $n(2\omega) \leq n(\omega)$; deoarece însă în cazul unei dispersii normale indicele de refracție crește cu frecvența, rezultă că această condiție s-ar putea realiza numai în cazul în care în intervalul dintre frecvențele ω și 2ω în mediul optic neliniar și izotrop dat există un inter-

val de dispersie anomală, adică între aceste frecvențe să existe o linie de absorbție. Din condiția (80.9) rezultă pentru un corp optic izotrop relația

$$n(2\omega) = n(\omega),$$

care chiar și în cazul existenței între frecvențele ω și 2ω a unei benzi de absorbție, pentru o frecvență ω , dată, se poate realiza numai din întâmplare.

În cristalele optic anizotrope direcțiile de sincronism pot exista și în absența liniilor de absorbție dintre frecvențele ω și 2ω . Să examinăm, de exemplu, cum se pot determina direcțiile de sincronism pentru generarea unei armonice de ordinul doi de către unda de frecvență fundamentală, în cristalele uniaxe. În acest caz trebuie satisfăcută relația

$$n(2\omega, \mathbf{d}_1) = n(\omega, \mathbf{d}). \quad (80.11)$$

Vom căuta direcțiile de sincronism cu ajutorul suprafețelor indicilor de refracție. Datorită dispersiei, diferitelor frecvențe le vor corespunde suprafețe ale indicilor de refracție diferite; în cazul unei dispersii normale, suprafața care corespunde frecvenței mai mari are dimensiuni mai mari.

Dacă pe o axă comună și cu un centru comun se desenează suprafețele indicilor de refracție pentru frecvențele ω și 2ω (secțiunile acestor suprafețe se pot vedea în figura 80.1), atunci dreptele care unesc centrul cu cercul după care se intersectează aceste

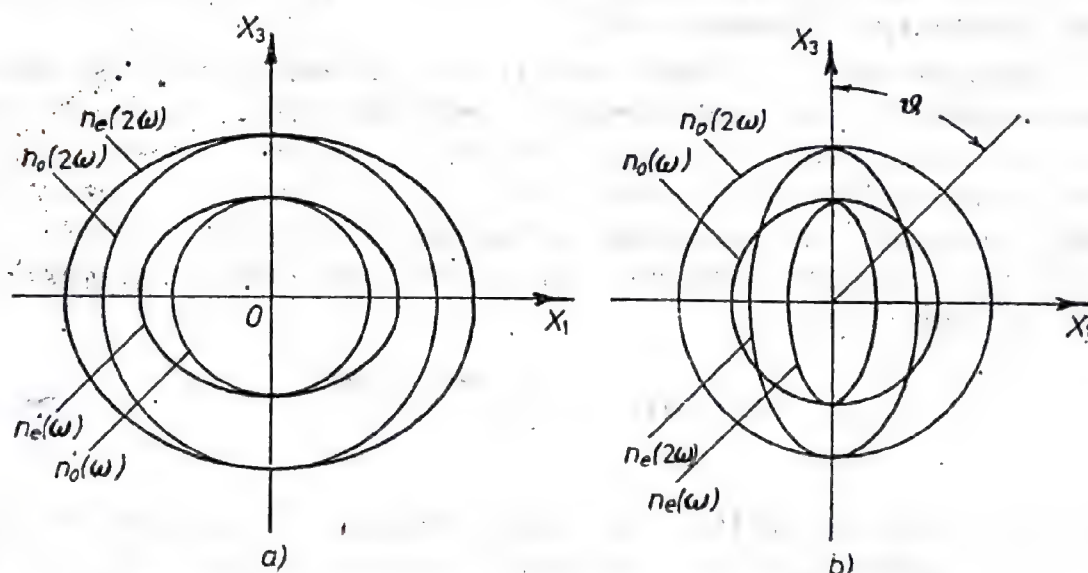


Fig. 80.1. Secțiuni ale suprafeței indicilor de refracție ai unor cristale uniaxe: a) cristal optic pozitiv, nu are direcții de sincronism; b) cristal optic negativ, are direcții de sincronism ce fac unghiul θ cu axa optică.

suprafețe sînt direcțiile de sincronism. Direcțiile de sincronism fac un con a cărui axă este paralelă cu axa optică a cristalului. În cazul unei anizotropii optice mici (sau al unei dispersii prea intense) aceste suprafețe nu se intersectează; înseamnă că în cristal nu există direcții de sincronism pentru dublarea acestei frecvențe.

Din figura 80.1 reiese clar că direcțiile de sincronism pentru cristalele optic pozitive și pentru cele optic negative se determină respectiv din condițiile (în continuare, în acest paragraf, formulele analoage, dar care nu coincid, vor fi notate cu + și cu - la numărul formulelor pentru cristalele optic pozitive ($N_e > N_o$) și, respectiv, pentru cristalele optic negative ($N_e < N_o$))

$$n_e(\omega) = n_o(2\omega), \quad (80.12^+)$$

$$n_o(\omega) = n_e(2\omega); \quad (80.12^-)$$

în ambele cazuri cele două unde, care satisfac condiția de sincronism sînt polarizate în direcții reciproc perpendiculare. În cristalele optic uniaxe, indicele de refracție al unei ordinare, n_o , nu depinde de direcția de propagare: $n_o = N_o$, iar indicele de refracție al unei extraordinare, n_e , depinde de unghiul θ dintre direcțiile de propagare a unei și axa optică

$$n_e^{-2} = N_e^{-2} \sin^2 \theta + N_o^{-2} \cos^2 \theta;$$

aici, N_o și N_e sînt indicii de refracție principali (v. § 35). Înlocuind aceste valori în condiția (80.12), găsim, după calcule simple, unghiul θ dintre direcția de sincronism și axa optică a cristalului

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{N_o^{-2}(\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}{N_o^{-2}(\omega) - N_e^{-2}(\omega)}}, \quad (80.13^+)$$

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{N_o^{-2}(\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}{N_e^{-2}(2\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}}. \quad (80.13^-)$$

Dacă mărimea $\sin \theta$, calculată după formula corespunzătoare din (80.13), nu depășește unitatea în valoare absolută, cum și trebuie, atunci cristalul respectiv are un con întreg de direcții de sincronism: condiția de sincronism este satisfăcută de unda extraordinară, sau, respectiv, ordinară, de frecvență ω , care se propagă în acest cristal în direcția

$$\mathbf{m} = (\mathbf{e}_1 \cos \varphi + \mathbf{e}_2 \sin \varphi) \sin \theta + \mathbf{e}_3 \cos \theta, \quad (80.14)$$

în care e_1, e_2, e_3 sînt versorii sistemului de coordonate cristalofizic, unghiul φ este arbitrar, iar unghiul θ se determină cu ajutorul formulelor (80.13). Însă această undă trebuie să genereze și polarizarea pătratică, și anume într-o direcție astfel încît unda de frecvență dublă să fie polarizată perpendicular pe unda inițială.

Direcția vectorului intensitate a cîmpului electric, E , din unda ordinară coincide cu direcția vectorului inducție electrică, D . Vectorul unitar al acestei direcții pentru unda a cărei normală este determinată de formula (80.14), este egal cu

$$e_0 = d_0 = e_1 \sin \varphi - e_2 \cos \varphi. \quad (80.15)$$

În unda extraordinară, vectorii unitari ai inducției electrice, d_e , și intensității cîmpului electric, e_e , sînt diferiți și egali respectiv cu

$$d_e = (e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi) \cos \theta - e_3 \sin \theta, \quad (80.16)$$

$$e_e = A[N_o^{-2}(e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi) \cos \theta - N_e^{-2}e_3 \sin \theta], \quad (80.17)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{N_o^{-4} \cos^2 \theta + N_e^{-4} \sin^2 \theta}}. \quad (80.18)$$

Unda de frecvență dublă este generată de componenta $e(2\omega) \cdot P(2\omega)$ a vectorului polarizare pătratică, $P(2\omega)$, în direcția vectorului intensitate a cîmpului electric în unda armonice de ordinul doi, $e(2\omega)$; această componentă este egală cu frecvența fundamentală, $E^2 = E^2(\omega)$, înmulțită respectiv cu una dintre contracțiile tensorului susceptibilității pătratice,

$$\chi = \chi(2\omega, \omega, \omega)$$

avînd vectorii unitari e_o și e_e dați de relațiile

$$\begin{aligned} e_o \cdot \chi : e_e e_e = A^2 \{ & N_o^{-4} \cos^2 \theta [\chi_{12} \sin^3 \varphi - (\chi_{22} - \chi_{16}) \sin^2 \varphi \cos \varphi + \\ & + (\chi_{11} - \chi_{26}) \sin \varphi \cos^2 \varphi - \chi_{21} \cos^3 \varphi] - \\ & - N_o^{-2} N_e^{-2} \sin \vartheta \cos \vartheta [\chi_{14} \sin^2 \varphi + (\chi_{15} - \chi_{24}) \sin \varphi \cos \varphi - \chi_{25} \cos^2 \varphi] + \\ & + N_e^4 \sin^2 \vartheta [\chi_{13} \sin \varphi - \chi_{23} \cos \varphi] \}, \end{aligned} \quad (80.19^+)$$

$$\begin{aligned} e_e \cdot \chi : e_o e_o = A \{ & N_o^{-2} \cos \vartheta [\chi_{21} \sin^3 \varphi + (\chi_{11} - \chi_{26}) \sin^2 \varphi \cos \varphi + \\ & + (\chi_{22} - \chi_{16}) \sin \varphi \cos^2 \varphi + \chi_{12} \cos^3 \varphi] - \\ & - N_e^{-2} \sin \vartheta [\chi_{31} \sin^2 \varphi - \chi_{36} \sin \varphi \cos \varphi + \chi_{32} \cos^2 \varphi] \}. \end{aligned} \quad (80.19^-)$$

Aceste contracții pot fi considerate drept componentele χ'_{122} și χ'_{211} ale tensorului χ în sistemul de coordonate special, $X'_1 X'_2 X'_3$, ale cărui axe $X'_1 \parallel e_o$ și $X'_2 \parallel e_e$. Coeficienții susceptibilității pătra-

tice, χ_{iu} , din formulele (80.19) se determină folosind regulile de recalculare (trecere la noile notații) (ele sînt la fel cu cele pentru coeficienții piezoelectricei, d_{iu} ; aceleași reguli de recalculare pentru coeficienții χ_{iu} utilizează Ahmanov și Hohlov (1964) și Blombergen (1966))

$$\chi_{iu} = \begin{cases} \chi_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\chi_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases} \quad (80.20)$$

care corespund regulilor general acceptate pentru diadele $(EE)_\mu$

$$(EE)_\mu = E_k E_l \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6).$$

Să substituim în formulele (80.19) valorile coeficienților χ_{iu} și să trecem rezultatele în tabelul 80.1.

Din tabelul 80.1 se vede că cristalele negative din clasele 422, 622, $\infty 2$ precum și cristalele pozitive din clasele $4mm$, $6mm$ și ∞m în general nu se pot folosi pentru generarea armonice de ordinul doi. În realitate sînt mult mai multe clase practic nepotrivite pentru generarea armonice de ordinul doi. Este vorba despre faptul că tensorul $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ devine nesimetric în raport cu indicii numai datorită dispersiei. Dacă în întreg intervalul de frecvențe $(\omega - 2\omega)$ cristalul este transparent, atunci dispersia în acest interval de frecvențe este mică, astfel încît tensorul $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ este apropiat de tensorul simetric $\tilde{\chi}_{ikl} = \chi_{(ikl)}$. Calculînd contracțiile cuprinse în tabelul 80.1 pentru tensorul simetrizat, găsim că și cristalele pozitive din clasele 4, 6, ∞ , 422, 622, $\infty 2$ nu sînt utilizabile practic pentru generarea unei armonice de ordinul doi.

Cele mai adecvate pentru generarea unei armonice de ordinul doi sînt acele direcții de sincronism care duc la o valoare maximă a expresiei tabelate corespunzătoare. De exemplu, în cazul cristalelor optic uniaxe, negative, de dihidrofosfat de potasiu (KDP) și de dihidrofosfat de amoniu (ADP) — clasa $\bar{4}2m$ — utilizate pentru dublarea frecvenței unei radiații laser, maximul expresiei tabelate se atinge pentru $\varphi = 45^\circ$. După cum se vede din formula (80.14), aceasta corespunde direcției normalei de undă

$$m = \frac{1}{\sqrt{2}} (e_1 + e_2) \sin \theta + e_3 \cos \theta.$$

Cristalele biaxe, lipsite de centru de simetrie, sînt, de asemenea potrivite pentru generarea armonice de ordinul doi; din punctul de vedere al fizicii cristalelor ele sînt chiar de preferat

cristalelor uniaxe, deoarece prezintă o gamă mai variată de direcții disponibile. Însă analiza posibilităților care apar în acest caz este mult mai complicată și probabil este mai convenabil să nu se facă în forma generală care conduce la formule prea complicate, ci pentru fiecare cristal în parte (v. Orlov, 1969).

Din punct de vedere cristalofizic, generarea armonice de ordinul trei se studiază în mod analog. Deoarece tensorul θ , care

Tabelul 80.1

Componenta vectorului polarizare pătratică după direcția intensității câmpului electric din unda armonice de ordinul doi

Clasele	Funcția $F = F(\chi, N, \theta, \varphi)$	
	Cristale pozitive: $e(2\omega) \cdot P(2\omega) = A^2 F, N = N(\omega)$	Cristale negative: $e(2\omega) \cdot P(2\omega) = AF, N = N(2\omega)$
3	$N_o^{-4} \cos^2 \theta (\chi_{11} \sin 3\varphi + \chi_{22} \cos 3\varphi) - \frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{14} \sin 2\theta$	$N_o^{-2} \cos \theta (\chi_{22} \sin 3\varphi - \chi_{11} \cos 3\varphi) - N_e^{-2} \chi_{31} \sin \theta$
32	$N_o^{-4} \chi_{11} \cos^2 \theta \sin 3\varphi - \frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{11} \sin 2\theta$	$N_o^{-2} \chi_{11} \cos \theta \cos 3\varphi$
3m	$N_o^{-4} \chi_{22} \cos^2 \theta \cos 3\varphi - \frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{14} \sin 2\theta$	$N_o^{-2} \chi_{22} \cos \theta \sin 3\varphi - N_e^{-2} \chi_{31} \sin \theta$
4, 6, ∞	$-\frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{14} \sin 2\theta$	$-N_e^{-2} \chi_{31} \sin \theta$
422, 622, $\infty 2$	$-\frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{14} \sin 2\theta$	0
4mm, 6mm, ∞m	0	$-N_e^{-2} \chi_{31} \sin \theta$
$\bar{4}$	$\frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \sin 2\theta \times (\chi_{14} \cos 2\varphi + \chi_{24} \sin 2\varphi)$	$N_e^{-2} \sin \theta \left(\chi_{31} \cos 2\varphi + \frac{1}{2} \chi_{36} \sin 2\varphi \right)$
$\bar{4}2m$	$\frac{1}{2} N_o^{-2} N_e^{-2} \chi_{14} \sin 2\theta \cos 2\varphi$	$\frac{1}{2} N_e^{-2} \chi_{36} \sin \theta \sin 2\varphi$
$\bar{6}$	$N_o^{-4} \cos^2 \theta (\chi_{11} \sin 3\varphi + \chi_{22} \cos 3\varphi)$	$N_o^{-2} \cos \theta (\chi_{22} \sin 3\varphi - \chi_{11} \cos 3\varphi)$
$\bar{6}m2$	$N_o^{-4} \chi_{22} \cos^2 \theta \cos 3\varphi$	$N_o^{-2} \chi_{22} \cos \theta \sin 3\varphi$

definește armonica, este de tip par, pentru generarea unei armonice de ordinul trei pot fi utilizate și cristale din clasele cu centru de simetrie, astfel încât simetria acestui efect să fie afectată numai de subsistem nu și de clasa cristalului.

În ultimele două paragrafe a fost analizat numai aspectul cristalofizic al unora dintre cele mai simple probleme din optica neliniară a cristalelor. Asupra opticii neliniare, în general, se pot consulta lucrările lui Ahmanov și Hohlov (1964); Ahmanov (1969); Blombergen (1966); Klimontovici (1966); Pekara (1973); Schubert și Wilhelmi (1973).

§ 81. ACTIVITATEA OPTICĂ A CRISTALELOR

În toate mediile condensate, inclusiv în cristale, se produce *dispersia spațială*: vectorul polarizării electrice, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ este determinat nu numai de valoarea vectorului intensitate a câmpului electric, \mathbf{E} , într-un singur punct, \mathbf{r} , ci și de valorile lui din vecinătatea acestui punct. Dacă câmpul electric ar fi omogen, atunci valorile lui în vecinătatea punctului \mathbf{r} ar fi aceleași ca și în însuși punctul \mathbf{r} , astfel încât dispersia spațială nu s-ar manifesta în nici un fel. Din această cauză, dispersia spațială poate fi tratată drept dependența vectorului polarizare electrică, \mathbf{P} , nu numai de vectorul \mathbf{E} , ci și de derivatele lui în raport cu spațiul. Mărginindu-ne la primii termeni ai dezvoltării, obținem

$$P_i = \alpha_{ij} E_j + \beta_{ijk} \frac{\partial E_j}{\partial x_k}, \quad \mathbf{P} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\beta} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{r}}. \quad (81.1)$$

În cristalele la care tensorul $\boldsymbol{\beta}$ este diferit de zero, apare dispersia spațială de ordinul întâi; aceste cristale se numesc cristale *optic active*. În toate celelalte este posibilă numai dispersia spațială de ordinul doi: în acestea, polarizarea depinde numai de derivatele spațiale de ordinul doi, nu și de primele derivate. Ne vom limita la studiul activității optice (despre influența dispersiei spațiale de ordinul doi asupra proprietăților optice ale cristalelor se găsesc amănunte în Agranovici și Ghinzburg, 1965).

În cadrul opticii cristalelor este mai comod să se studieze intensitatea câmpului electric, \mathbf{E} , în funcție de inducția electrică \mathbf{D} ; atunci, în loc de (81.1) vom scrie

$$E_i = \eta_{ij} D_j + \gamma_{ijk} \frac{\partial D_j}{\partial x_k}, \quad \mathbf{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{D} + \boldsymbol{\gamma} : \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial \mathbf{r}}. \quad (81.2)$$

Deoarece pentru o undă monocromatică cu vectorul de undă \mathbf{k} , derivata $\partial \mathbf{D} / \partial \mathbf{r} = i \mathbf{D} \mathbf{k}$, formula (81.2) capătă, pentru această undă, forma

$$E_j = (\eta_{jl} + i \gamma_{jlm} k_m) D_l, \quad \mathbf{E} = (\boldsymbol{\eta} + i \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{k}) \cdot \mathbf{D}. \quad (81.3)$$

Expresia din paranteză joacă rolul tensorului impermitivității dielectrice puțin modificat. De aici rezultă că dispersia spațială determină dependența tensorului impermitivității dielectrice de vectorul de undă exact la fel cum dispersia obișnuită, adică dispersia în funcție de frecvență sau timp, duce la dependența acestui tensor de frecvență. Formula (81.3) arată că corecția la tensorul impermitivității dielectrice, care depinde liniar de vectorul de undă, este pur imaginară. Întrucît vectorul de undă, \mathbf{k} , este invers proporțional cu lungimea de undă λ (într-adevăr, $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{m}$, unde \mathbf{m} este vectorul unitar al normalei de undă), această corecție este și ea invers proporțională cu λ . Însă deoarece singura caracteristică a unui cristal infinit, care are ca dimensiune lungimea, este dimensiunea celulei elementare, a , rezultă clar că ordinul de mărime al acestei corecții este a/λ .

Pentru frecvențele pentru care cristalul este transparent, tensorul impermitivității dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$, este hermitic, adică partea sa reală este simetrică, iar cea imaginară antisimetrică (v. Landau și Lifșit, 1957, § 76, relația (76.4), și Agranovici și Ghinzburg, 1965, § 1, relația (1.21)). Rezultă deci că tensorul $\boldsymbol{\gamma}$ este antisimetric în raport cu primii doi indici

$$\gamma_{jlm} = -\gamma_{ljm} \quad (81.4)$$

adică simetria lui internă este $\{V^2\}V$. Relația de dualitate,

$$\{V^2\}V \sim \varepsilon V^2 \quad (81.5)$$

permite introducerea pseudotensorului de rotație, \mathbf{G} , cu exactitate de pînă la un factor scalar, $\lambda/(2\pi)$ al tensorului dual $\boldsymbol{\gamma}$

$$G_{ln} = \frac{\pi}{\lambda} \delta_{lms} \gamma_{smn}, \quad \frac{2\pi}{\lambda} \gamma_{ijn} = \delta_{ijl} G_{ln}. \quad (81.6)$$

Acum, relația (81.3) se poate scrie sub forma

$$E_j = (\eta_{jk} + i \delta_{jki} G_{ln} m_n) D_k, \quad \mathbf{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{D} + i \mathbf{D} \times \mathbf{G} \cdot \mathbf{m}. \quad (81.7)$$

Să stabilim care sînt undele plane ce se pot propaga într-un mediu caracterizat de ecuația de material (81.7). Pentru aceasta vom introduce un sistem de coordonate drept, a cărui axă X_3 este orientată după vectorul normalei de undă, m , iar axele X_1 și X_2 coincid cu axele principale ale secțiunii centrale a indicatricei optice a cristalului cu planul frontului de undă: X_1 cu axa principală mare, iar X_2 cu axa principală mică. În acest sistem de coordonate, primele două ecuații (81.7) capătă forma

$$\begin{aligned} E_1 &= n_{01}^{-2} D_1 + iG_{33} D_2, \\ E_2 &= -iG_{33} D_1 + n_{02}^{-2} D_2. \end{aligned} \quad (81.8)$$

În sistemul de coordonate ales

$$D_3 = 0 \text{ și } \eta_{12} = 0,$$

iar

$$\eta_{11} = n_{01}^{-2} \text{ și } \eta_{22} = n_{02}^{-2};$$

aici n_{01} și n_{02} sînt indicii de refracție ai undelor care s-ar propaga într-o direcție dată, dacă nu ar exista dispersia spațială, și anume, $n_{01} \geq n_{02}$.

După cum se știe, din ecuațiile Maxwell pentru unda electromagnetică plană rezultă că

$$E - mm \cdot E = n^{-2} D \quad (81.9)$$

(v. § 34). În sistemul de coordonate ales de noi aceasta înseamnă că

$$E_1 = n^{-2} D_1 \text{ și } E_2 = n^{-2} D_2.$$

Folosindu-ne de aceasta, eliminăm pe E_1 și E_2 din ecuațiile (81.8)

$$\begin{aligned} (n_{01}^{-2} - n^{-2}) D_1 + iG_{33} D_2 &= 0, \\ -iG_{33} D_1 + (n_{02}^{-2} - n^{-2}) D_2 &= 0. \end{aligned} \quad (81.10)$$

Sistemul de două ecuații liniare omogene în componentele vectorului inducție, astfel obținut, are soluție nebanală numai dacă determinantul său este zero

$$(n_{01}^{-2} - n^{-2})(n_{02}^{-2} - n^{-2}) - G_{33}^2 = 0. \quad (81.11)$$

Să examinăm mărimea

$$\rho = \frac{1}{2G_{33}} [\sqrt{(n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})^2 + (2G_{33})^2} - (n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})]. \quad (81.12)$$

Din condiția $n_{01} \geq n_{02}$, introdusă mai înainte, rezultă inegalitatea $|\rho| \leq 1$, semnul lui ρ coinzind cu semnul lui G_{33} . Este ușor de verificat că soluțiile ecuației de gradul doi, (81.1), sînt de forma

$$\begin{aligned} n_1^{-2} &= n_{01}^{-2} - \rho G_{33}, \\ n_2^{-2} &= n_{02}^{-2} + \rho G_{33}. \end{aligned} \quad (81.13)$$

Deoarece $G_{33} \ll 1$, iar n_{01} și n_{02} sînt numere de ordinul unității, indicii de refracție n_1 și n_2 sînt egali, cu suficientă exactitate, cu

$$n_1 = n_{01} + \frac{1}{2} n_{01}^3 \rho G_{33}, \quad (81.14)$$

$$n_2 = n_{02} - \frac{1}{2} n_{02}^3 \rho G_{33}.$$

Înlocuind în sistemul (81.10) soluțiile n_1^{-2} și n_2^{-2} din (81.13), găsim raportul dintre componentele vectorilor inducție $\mathbf{D}^{(1)}$ și $\mathbf{D}^{(2)}$ pentru undele care se propagă cu vitezele c/n_1 și, respectiv, c/n_2

$$\frac{D_2^{(1)}}{D_1^{(1)}} = -\frac{D_1^{(2)}}{D_2^{(2)}} = i\rho. \quad (81.15)$$

Forma generală a vectorilor $\mathbf{D}^{(1)}$ și $\mathbf{D}^{(2)}$, care satisfac relația (81.15) este

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(1)} &= D^{(1)} (\mathbf{e}_1 + i\rho \mathbf{e}_2) \exp [i(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)})], \\ \mathbf{D}^{(2)} &= D^{(2)} (i\rho \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \exp [i(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)})], \end{aligned} \quad (81.16)$$

unde $D^{(\alpha)} \exp(i\varphi^{(\alpha)})$ este amplitudinea complexă, iar

$$k^{(\alpha)} = \omega n_{\alpha} / c \quad (\alpha = 1, 2).$$

Vectorii inducție electrică reprezintă părțile reale ale acestor vectori complecși

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \mathbf{D}^{(1)} &= \\ &= D^{(1)} [e_1 \cos(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)}) - \rho e_2 \sin(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)})], \\ \operatorname{Re} \mathbf{D}^{(2)} &= \\ &= D^{(2)} [-\rho e_1 \sin(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)}) + e_2 \cos(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)})]. \end{aligned} \quad (81.17)$$

În orice punct fixat al spațiului, vîrfurile vectorilor inducție, definiți de aceste relații, descriu, după timpul $T = 2\pi/\omega$, niște elipse care se află în planul frontului de undă, $x_3 = \text{const}$. Într-adevăr, formulele (81.17) pot fi scrise, respectiv, în forma

$$\begin{aligned} &\begin{cases} \operatorname{Re} D_1^{(1)} = D^{(1)} \cos(\omega t - \psi^{(1)}), \\ \operatorname{Re} D_2^{(1)} = \rho D^{(1)} \sin(\omega t - \psi^{(1)}); \end{cases} \\ &\begin{cases} \operatorname{Re} D_1^{(2)} = \rho D^{(2)} \sin(\omega t - \psi^{(2)}), \\ \operatorname{Re} D_2^{(2)} = D^{(2)} \cos(\omega t - \psi^{(2)}), \end{cases} \end{aligned} \quad (81.18)$$

în care

$$\psi^{(\alpha)} = k^{(\alpha)} x_3 + \varphi^{(\alpha)}.$$

Formulele (81.18) nu sînt altceva decît ecuațiile parametrice ale unei elipse, avînd raportul dintre axa mică și axa mare egal cu $|\rho|$ (acest raport se numește *elipticitate*). În tabelul 81.1 sînt prezentate elipsele descrise de vîrfurile vectorilor $\operatorname{Re} \mathbf{D}^{(1)}$ și $\operatorname{Re} \mathbf{D}^{(2)}$. Așadar, ambele unde electromagnetice care se propagă într-un cristal optic activ în direcția în care componenta normală a pseudotensorului de rotație este diferită de zero, sînt polarizate eliptic; elipsele lor de polarizare au același raport al axelor, fiind însă rotite una față de alta cu 90° și parcurse în sensuri opuse.

Polarizarea eliptică se numește *dreaptă* (dextrogiră) dacă din punctul de vedere al unui observator care privește razele de lumină ce vin înspre el, vectorul \mathbf{D} se rotește în sensul acelor de ceas, și *stînga* (levogiră), în cazul contrar*; din tabelul 81.1 se vede că pentru $G_{33} > 0$, unda care se propagă mai repede ($D^{(2)}$)

* Această definiție tradițională a polarizării drepte și celei stîngi este acceptată în majoritatea lucrărilor (Șubnikov, Flint și Boki, 1940; Landsberg, 1957; Landau și Lifșit, 1957; Fiodorov, 1958; Șubnikov, 1958; Nye, 1967). În ultimul timp însă se generalizează o definiție exact inversă (Landau și Lifșit, 1967 și 1969; Berestecki, Lifșit, Pitaevski, 1968; Feynman, 1969). Conform definiției tradiționale, vîrfurile vectorului \mathbf{D} , în cazul propagării unei unde polarizate drept se propagă în spațiu după filetul unui șurub stîng, pe cînd noua definiție nu mai conține acest neajuns.

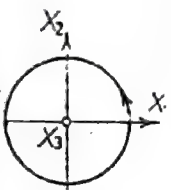
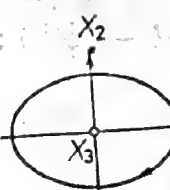
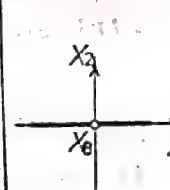
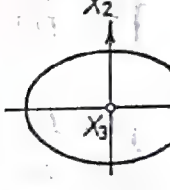
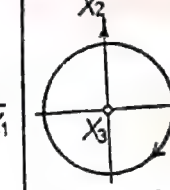
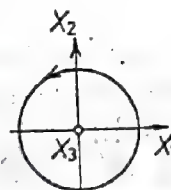
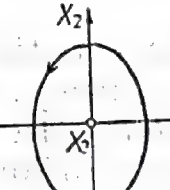
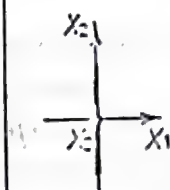
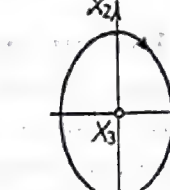
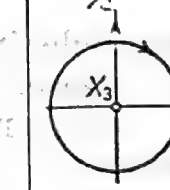
are polarizare dreaptă, pe cînd pentru $G_{33} < 0$, are polarizare stîngă.

Activitatea optică apare clar în cazul propagării luminii de-a lungul axei optice a cristalului. Atunci $n_{01} = n_{02} = n_0$ și

$$\rho = \frac{|G_{33}|}{G_{33}} = \text{sign } G_{33} = \begin{cases} 1, & \text{dacă } G_{33} > 0, \\ -1, & \text{dacă } G_{33} < 0. \end{cases} \quad (81.19)$$

Tabelul 81.1

Polarizarea undelor luminoase pentru diferite valori ale parametrului ρ
(unda a doua se propagă mai repede decît prima ($n_2 < n_1$))

G_{33}	$G_{33} < 0$		$G_{33} = 0$	$G_{33} > 0$	
ρ	$\rho = -1$	$-1 < \rho < 0$	$\rho = 0$	$0 < \rho < 1$	$\rho = 1$
$\text{Re}D(1)$					
$\text{Re}D(2)$					

Egalitatea (81.18) se transformă, în acest caz, în ecuația parametrică a unui cerc. Din această cauză, de-a lungul axelor optice ale cristalelor optic active se propagă unde circular-polarizate. Indicii lor de refracție, conform relației (81.14) și (81.19), sînt egali cu

$$n_1 = n_0 + \frac{1}{2} n_0^3 |G_{33}|, \quad (81.20)$$

$$n_2 = n_0 - \frac{1}{2} n_0^3 |G_{33}|.$$

Și în acest caz, pentru $G_{33} > 0$ se propagă mai repede unda polarizată drept, iar pentru $G_{33} < 0$, unda polarizată stîng. Indicele de refracție al unei unde polarizate circular stîng se notează cu n_l

sau n_g (după prima literă a cuvintului englezesc *left* sau a celui franțuzesc *gauche*), iar polarizarea dreaptă cu n_r sau n_d (englezescul *right*, franțuzescul *droit*). Evident,

$$\begin{aligned} n_l &= n_0 + \frac{1}{2} n_0^3 G_{33}, \\ n_r &= n_0 - \frac{1}{2} n_0^3 G_{33}. \end{aligned} \quad (81.21)$$

Dacă dubla refracție a unui cristal nu este foarte mică, elipticitatea undeii, $|\rho|$, se micșorează repede odată cu deviația normalei de undă de la axa optică a cristalului. Cînd termenii din expresia de sub radical din formula (81.12) devin egali,

$$|\rho| = \sqrt{2} - 1 \approx 0,414.$$

Este ușor de calculat că în cazul cristalelor uniaxe această valoare a elipticității se atinge pentru o deviație a normalei de undă cu un unghi θ , determinat din egalitatea

$$\sin \theta = \sqrt{\left| \frac{2G_{33}}{N_e^{-2} - N_o^{-2}} \right|}. \quad (81.22)$$

Deoarece G_{33} este de ordinul a $10^{-4} - 10^{-5}$, iar $N_e^{-2} - N_o^{-2}$ reprezintă, de obicei, cîteva sutimi, unghiul θ nu depășește cîteva grade. Această evaluare se poate extinde și asupra cristalelor biaxe.

În cazul în care deviația normalei de undă față de axa optică crește în continuare, elipticitatea devine foarte mică, și pentru calcularea ei, în loc de (81.12) se poate folosi formula aproximativă

$$\rho = \frac{G_{33}}{n_{02}^2 - n_{01}^2}. \quad (81.23)$$

Prin urmare, undele luminoase polarizate eliptic, care se propagă în cristalele optic active, birefringente, sînt, după majoritatea covârșitoare a direcțiilor, apropiate de cele liniar polarizate. Dimpotrivă, în cristalele optic active din sistemul cubic și în corpurile izotrope toate undele luminoase sînt polarizate circular.

Să analizăm lumina polarizată liniar, care cade normal pe o lamă plan-paralelă transparentă, de grosime d , tăiată dintr-un cristal optic activ, perpendicular la axa optică. Să introducem un sistem de coordonate cartezian, drept, $X_1 X_2 X_3$, astfel încît axa

X_3 să fie orientată după normala de undă, iar axa X_1 să coincidă cu direcția de vibrație a luminii incidente pe lamă. Fie $x_3 = 0$ fața anterioară (în raport cu direcția de propagare a luminii), iar $x_3 = d$, fața ei posterioară.

Vectorul inducție electrică aflându-se exact în fața cristalului vibrează după legea $e_1 \cos \omega t$. Intrînd în cristal, unda se împarte în două unde polarizate circular, de aceeași intensitate: la cea levogiră vectorul inducție este

$$e_1 \cos(k^{(l)} x_3 - \omega t) - e_2 \sin(k^{(l)} x_3 - \omega t),$$

iar la cea dextrogiră

$$e_1 \cos(k^{(r)} x_3 - \omega t) + e_2 \sin(k^{(r)} x_3 - \omega t),$$

vitezele lor fiind respectiv $\omega/k^{(l)}$ și $\omega/k^{(r)}$. Străbătînd lama, aceste unde se reunesc din nou într-o singură undă, a cărei vibrație imediat după lamă este reprezentată de vectorul

$$e_1[\cos(k^{(l)} d - \omega t) + \cos(k^{(r)} d - \omega t)] - e_2[\sin(k^{(l)} d - \omega t) - \sin(k^{(r)} d - \omega t)].$$

Efectuînd transformări trigonometrice elementare și ținînd cont că

$$k^{(l)} + k^{(r)} = \frac{2\omega n_0}{c}$$

iar

$$k^{(l)} - k^{(r)} = \frac{2\pi n_0^3 G_{33}}{\lambda_0}$$

în care

$$n_0 = \frac{1}{2}(n_l + n_r)$$

este indicele de refracție mediu pentru lumina care se propagă de-a lungul axei optice, λ_0 fiind lungimea undei luminoase în vid, obținem vectorul direcției vibrațiilor undei emergente sub forma

$$\left(e_1 \cos \frac{\pi n_0^3 G_{33} d}{\lambda_0} - e_2 \sin \frac{\pi n_0^3 G_{33} d}{\lambda_0} \right) \cos \left[\omega \left(t - \frac{n_0 d}{c} \right) \right].$$

Aceasta înseamnă că unda care părăsește cristalul este tot liniar polarizată, vectorul polarizare fiind rotit în comparație cu direcția inițială cu unghiul

$$\psi = \frac{\pi n_0^2 G_{33} d}{\lambda_0} \quad (81.24)$$

în sensul acelor de ceas. Din această cauză, se spune că la propagarea luminii de-a lungul axei optice a cristalelor optice active se produce *rotirea planului de polarizare*; dacă $G_{33} > 0$, aceasta este o rotație dextrogiră, dacă $G_{33} < 0$, rotația este levogiră. Trebuie însă să fie foarte clar că în cristal nu se propagă nici o undă liniar polarizată cu o direcție de polarizare care se rotește treptat, ci două unde circular polarizate, care au viteze diferite; numai datorită interferenței acestor unde, la ieșirea din cristal apare din nou o undă liniar polarizată, a cărei direcție de polarizare face cu direcția de polarizare a undei incidente unghiul ψ .

Activitatea optică a cristalelor se caracterizează adesea printr-o mărime numită *rotație specifică* (putere rotatorie), adică unghiul de rotire a planului de polarizare pe distanța de 1 mm. Puterea rotatorie pentru câteva cristale este dată în tabelul 81.4.

Activitatea optică a cristalelor și, în particular, mărimea puterii rotatorii, depinde substanțial de frecvența luminii; acest fenomen se numește dispersia activității optice (dispersie rotatorie). Dacă pe o lamă care rotește planul de polarizare trimitem, lumină albă, liniar polarizată, atunci fiecare dintre componentele monocromatice ale luminii emergente va fi liniar polarizată, poziția planului de polarizare fiind însă rotită în funcție de lungimea de undă. În absența unui analizor lumină va fi percepută albă, dar dacă o trecem printr-un analizor, ea va apărea colorată, culoarea schimbându-se prin rotirea analizorului.

În intervalele de transparență a cristalului, mărimea puterii rotatorii, α , crește cu frecvența luminii, ω , aproximativ ca ω^2 , tensorul de rotație, G , aproximativ ca ω , iar tensorul activității optice, γ , depinde relativ slab de frecvență. Dependența de frecvență a acestor mărimi pentru cristalul de cuarț (clasa 32) este dată în tabelul 81.2 (λ_0 — lungimea undei luminoase în vid). Se observă că activitatea optică a cristalului ca atare este cel mai comod de caracterizat prin tensorul γ . În acest scop se poate utiliza și parametrul adimensional G_{33}/a , în care a este constanta rețelei pe direcția de propagare a luminii.

Dacă normala la lamă face un unghi suficient de mare cu axa optică a cristalului, modificarea caracterului polarizării luminii care trece prin această lamă se va deosebi esențial de cea examinată mai sus. Activitatea optică apare acum sub formă de dublă refracție eliptică. Vom folosi sistemul de coordonate introdus la începutul paragrafului: axa X_3 să coincidă cu direcția de propagare a luminii, iar axele X_1 și X_2 cu axele principale ale secțiunii centrale a indicatricei optice cu planul frontului de undă, axa X_1 cu axa mare, iar axa X_2 cu axa mică ($n_{01} > n_{02}$).

Dispersia rotației specifice, α , a componentelor pseudotensorului de girație, G_{33} , a tensorului activității optice, γ_{123} , și a parametrului $G_{33}\lambda/a$ într-un cristal de cuarț

λ_0 , nm	α , grad/mm	G_{33} , 10^{-5}	γ_{123} , pm	$G_{33}\lambda/a$	λ_0 , nm	α , grad/mm	G_{33} , 10^{-5}	γ_{123} , pm	$G_{33}\lambda/a$
686,7	15,55	1,62	1,15	0,0134	486,1	32,69	2,37	1,185	0,0138
656,3	17,22	1,71	1,16	0,0135	430,8	42,37	2,70	1,19	0,0139
589,3	21,67	1,93	1,17	0,0136	396,9	50,98	2,97	1,20	0,0141
527,0	27,46	2,17	1,18	0,0137					

Să luăm următorul exemplu simplu : pe o lamă eliptic birefringentă cade o radiație polarizată liniar cu direcția de vibrație e_1 . În cazul absenței activității optice ($G_{33} = 0$), radiația și-ar păstra polarizarea atât în lamă cât și la ieșirea din ea. Din această cauză, toate modificările caracterului polarizării unei asemenea radiații după trecerea ei prin lama cristalină, eliptic birefringentă sînt determinate exclusiv de activitatea optică a cristalului.

Pătrunzînd în cristal, unda liniar polarizată se divide în două unde eliptic polarizate, așa cum se vede din figura 81.1, *a*. Săgețile arată sensul de parcurgere a elipselor (pentru $G_{33} > 0$), iar

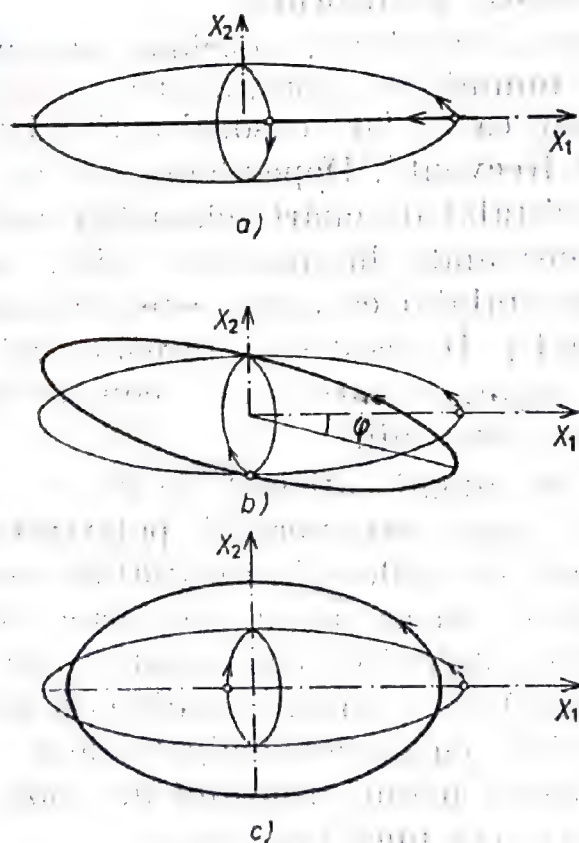


Fig. 81.1. Interferența undelor polarizate eliptic, care se propagă printr-un cristal optic activ : *a*) descompunerea la intrarea în lamă a unei polarizate liniar, avînd direcția de vibrație X_1 , în două unde polarizate eliptic ; *b*) rezultatul interferenței acestor unde după ce ele au traversat lama sfert de undă ; rezultatul interferenței lor după ce au traversat o lamă jumătate de undă. Elipticitatea este mult exagerată, pentru a fi mai evidentă. Direcțiile de rotație ale elipselor sînt date pentru $G_{33} > 0$.

punctele de pe elipsă reprezintă pozițiile vîrfurilor vectorilor **D** ale ambelor unde, la un moment dat. Elipticitatea

$$\rho \approx G_{33}/(n_{02}^2 - n_{01}^2)$$

este mult exagerată în figură. Segmentul de dreaptă (linia groasă) reprezintă suma ambelor vibrații; după cum și era de așteptat, acestea sînt pur și simplu vibrații liniar polarizate, orientate după axa X_1 .

Traversînd lama cu viteze diferite, undele capătă o anumită diferență de drum. Deoarece $n_1 > n_2$, unda descrisă de elipsa mai mică va fi în avans de fază față de unda descrisă de elipsa mai mare. De exemplu, dacă grosimea lamei este

$$d = \frac{\lambda_0}{n_1 - n_2} \left(\frac{1}{4} + m \right) \approx \frac{\lambda_0}{n_{01} - n_{02}} \left(\frac{1}{4} + m \right),$$

m fiind orice număr întreg (o asemenea lamă se numește „lamă sfert de undă”), unda mai puțin intensă o va depăși pe cea mai intensă cu un sfert de rotație. Această situație este prezentată în figura 81.1, *b*. Compunînd ambele vibrații ne vom convinge că datorită interferenței, din cristal va ieși o lumină eliptic polarizată; elipticitatea sa este aproximativ egală cu ρ , axa mare a elipsei vibrațiilor (indicată printr-o linie groasă în figura 81.1, *b*) fiind rotită față de direcția vibrațiilor radiației incidente cu un unghi $\varphi \approx \rho$, în sensul acelor de ceas.

Pentru o lamă de grosime

$$d = \frac{\lambda_0}{n_1 - n_2} \left(\frac{1}{2} + m \right)$$

(„lamă semiundă”) diferența de fază devine π . La ieșirea din lamă lumina va fi polarizată eliptic, vibrațiile ei fiind reprezentate în figura 81.1, *b* prin elipsa îngroșată; elipticitatea ei este circa 2ρ , iar axa mare coincide cu direcția vibrațiilor radiației incidente.

Datorită faptului că parametrul ρ , care caracterizează aceste efecte, este mic, și efectele sînt neînsemnate. Totuși cu o aparatură suficient de bună, ele pot fi puse în evidență, iar activitatea optică a cristalelor se determină nu numai de-a lungul axelor optice ale cristalelor, ci și în acele direcții în care se manifestă o dublă refracție considerabilă (Konstantinova, Ivanov, Gruceșnikov, 1969; Ivanov și Konstantinova, 1970). Ca rezultat devine posibilă determinarea suprafeței pseudotensorului de rotație (v., de exemplu, figura 81.2).

Activitatea optică a cristalelor se exprimă cu ajutorul pseudo-tensorului de rangul doi, G . Deoarece el este de tip impar, activitatea optică poate apărea numai în cristalele din clasele cu centru de simetrie. În general el este nesimetric, putînd fi descompus

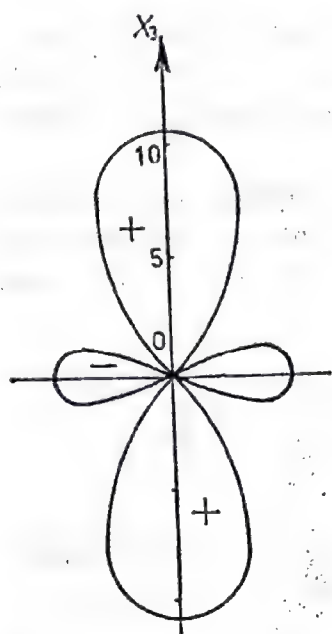


Fig. 81.2. Suprafața unui pseudotensor de rotație pentru cuarț α dextrogir, clasa 32. Plus înseamnă rotație dreaptă, minus, stîngă ; în 10^{-5} .

într-o parte simetrică (G^s) și una antisimetrică (G^a) (v. § 18). Valoarea lor, pentru activitatea optică a cristalelor, nu este nici pe departe egală. În ecuațiile (81.10), care definesc caracterul polarizării undelor luminoase în cristalele optic neactive, intră componenta G_{33} a pseudotensorului de rotație, care este complet determinată de partea lui simetrică. Din această cauză, în cadrul examinării polarizării undelor în cristal, pseudotensorul de rotație poate fi considerat simetric.

În tabelul E.7 este dată forma tensorului G^s pentru toate clasele cristalografice. Într-un sistem de coordonate cristalografic el are 9 forme diferite. Aceasta nu înseamnă însă deloc că există 9 clase de simetrie a activității optice: reducînd pseudotensorii descriși în tabelul E.7 la axe principale*, ne convingem că sînt 4 asemenea axe. Ele sînt date în tabelul 81.3.

Tensorul de rotație depinde de frecvență. Acest fenomen poartă numele de *dispersia activității optice* (dispersie rotatorie). Modificările tensorului de rotație, determinate de dispersie, pot duce la rotirea vectorilor săi proprii și deci la schimbarea orientării tensorului de rotație față de cristal. Diferența dintre numărul de componente independente ale pseudotensorului de rotație și numărul de parametri care caracterizează activitatea optică dă tocmai numărul de mărimi prin care este definită orientarea pseudotensorului de rotație față de cristalul dintr-o clasă dată.

Unei aceleiași clase de simetrie a activității optice îi pot corespunde cîteva clase de simetrie a dispersiei rotatorii. Astfel, dacă simetria activității optice este 222, simetria dispersiei ei poate fi sau 222, sau 2, sau 1. O situație asemănătoare am întîlnit deja,

* Un pseudotensor simetric de rangul doi se reduce la axe principale exact la fel ca un tensor simetric de rangul doi, numai că valorile lui proprii nu sînt scalari, ci pseudoscalari. Din această cauză, este necesar să urmărim dacă nu cumva, stabilind direcția și numerotarea vectorilor proprii nu am schimbat tripletul drept de versori într-unul stîng și invers : dacă l-am schimbat, atunci toate valorile proprii trebuie înmulțite cu -1 .

Simetria activității optice și a dispersiei ei

Tabelul 81.3

Valorile proprii ale pseudotensorului de rotație	$K(G(s))$	m	$K\omega(G(s))$	n	Clasele cristalografice și clasele limită, care fac parte dintr-o anumită clasă de dispersie a activității optice
$G_{(1)} \neq G_{(2)} \neq G_{(3)}$	222	3	1	6	1
			2	4	2
			222	3	222
$G_{(1)} = -G_{(2)}, G_{(3)} = 0$	$\bar{4}2m$	1	m	2	m
			$\bar{4}$	2	$\bar{4}$
			$\bar{4}2m$	1	$mm2, \bar{4}2m$
$G_{(1)} = G_{(2)} \neq G_{(3)}$	$\infty 2$	2	$\infty 2$	2	3, 32, 4, 422, 6, 622, $\infty, \infty 2$
$G_{(1)} = G_{(2)} = G_{(3)}$	$\infty \infty$	1	$\infty \infty$	1	23, 432, $\infty \infty$

Notății: $K(G(s))$ — clasa de simetrie a activității optice, $K\omega(G(s))$ — clasa de simetrie a dispersiei activității optice, m — numărul de parametri care caracterizează activitatea optică, n — numărul de componente independente ale pseudotensorului de rotație simetric.

studiind simetria proprietăților dielectrice ale cristalelor. În cazul în care simetria activității optice este $\bar{4}2m$, se deosebesc tot trei clase de simetrie pentru dispersia ei: în cazul cristalelor din clasele $\bar{4}2m$ și $mm2$ vectorii proprii sînt rigid legați de elementele de simetrie ale cristalului; pentru cristalele din clasa $\bar{4}$ este fixat un singur vector propriu, care corespunde valorii proprii egale cu zero; în fine în cazul cristalelor din clasa m , vectorul propriu care corespunde valorii proprii zero se poate roti odată cu variația frecvenței, rămînînd tot timpul în planul de simetrie al cristalului, iar ceilalți doi vectori proprii se rotesc împreună cu el, astfel încît fiecare dintre ei este tot timpul situat sub un unghi de 45° față de planul de simetrie. În total există 8 clase de simetrie a dispersiei activității optice; și ele sînt date în tabelul 81.3.

Activitatea optică se manifestă în birefrința eliptică sau circulară: o radiație monocromatică traversînd un cristal se descompune în două unde polarizate eliptic sau circular, de orientare contrară, care se propagă cu viteze diferite. Pentru aceasta este necesar să fie diferită de zero componenta pseudotensorului de rotație după direcția normalei de undă, $m \cdot G \cdot m$, însă în § 44 s-a arătat care asemenea componente pot fi diferite de zero numai în direcții elicoidale (v. fig. 44.1, d). O direcție este elicoidală în cazul și numai în cazul în care în grupul de simetrie al cristalului nu există nici o operație care să transforme o direcție dată în ea însăși,

dar care să transforme șurubul drept în șurub stîng, și anume : inversiile, oglindirile într-un plan perpendicular pe direcția dată, o rotație oarecare cu inversie (sau de oglindire) în jurul unei axe care să coincidă cu direcția dată și, în fine, reflexiile în oricare dintre planurile ce conțin direcția dată. Direcțiile neelicoidale și cele elicoidale speciale, pentru cristalele tuturor claselor sînt date în tabelul C.1. Dacă printre operațiile de simetrie ale cristalului fac parte inversiile, adică dacă cristalul nu are centru de simetrie, atunci nici o direcție din cristal nu poate fi elicoidală, așa că cristalul nu poate fi optic activ.

Dacă printre operațiile cristalului nu există nici o operație de speța a doua, adică cristalul este enantiomorf, atunci orice direcție este o direcție elicoidală. Numai în asemenea substanțe dubla refracție eliptică sau circulară este posibilă după orice direcție *. Toate substanțele enantiomorfe pot exista, în principiu, în două modificații : dextrogiră și levogiră. Pseudotensorii de rotație ai modificației dextrogire sînt contrari celor ai modificației levogire : $G_{lev} = -G_{dextr}$ (valorile tabelate se dau, de regulă, pentru modifiacția dextrogiră). Din această cauză, dacă într-o anumită direcție, în una dintre modificațiile enantiomorfe se propagă cu viteză mai mare unda polarizată drept, atunci în cealaltă modifiacție, în direcția respectivă se propagă cu viteză mai mare unda polarizată stîng.

Activitatea optică a cristalelor se manifestă cel mai pregnant în rotația planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axei optice. În mediile girotrope și în cristalele enantiomorfe ale sistemului cubic, ea este posibilă în orice direcție, rotația specifică fiind în toate direcțiile aceeași (pentru o radiație de o anumită frecvență). În cristalele enantiomorfe din categoria medie ea este posibilă în direcția singurei axe a lor. Cristalele din categoria inferioară au două axe optice. În clasa 222 ele sînt simetric echivalente, astfel încît rotația în jurul ambelor axe se produce în aceeași direcție și cu același unghi. În clasa 1 axele optice nu au nici o legătură între ele, astfel încît rotațiile lor specifice sînt diferite. În cristalele clasei 2 se poate realiza atît prima situație, cît și a doua, după cum axa de simetrie se află în planul axelor optice sau este perpendiculară pe acest plan. După cum se vede din tabelul 81.4, ambele situații sînt realizate : prima în cristalele de acid tartric, iar cea de a doua în cristalele de zahăr și în ramnoză.

* Aceasta nu înseamnă însă că se produce obligatoriu după toate direcțiile. În cazul cuarțului, de exemplu, componenta normală a pseudotensorului de rotație după direcția axei principale de simetrie și în direcțiile perpendiculare pe ea, au semne diferite. De aici rezultă existența unui con de direcții în care această componentă normală este egală cu zero, iar dubla refracție este liniară (v. fig. 81.2). Totuși simetria cristalelor de cuarț (clasa 32) nu impune existența unor asemenea direcții.

Rotația specifică a planului de polarizare α (în grad/mm)

Cristalul	Clasa	λ , nm	α
Clorat de sodiu, NaClO_3	23	589,3	$3,16^\circ$
Sulfat dublu de potasiu și litlu, KLiSO_4	6	589,3	$3^\circ 26'$
Sulfat de etilendiamină, $\text{C}_2\text{H}_4(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$	422	589,3	$15^\circ 30'$
Diacetilfenoltaleină, $\text{C}_{20}\text{H}_{12}\text{O}_4(\text{C}_2\text{H}_2\text{O})_2$	422	589,3	$19,7^\circ$
Cuarț, SiO_2	32	589,3	$21,67^\circ$
Cinabru, HgS	32	750	325°
Periodat de sodiu, $\text{NaIO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	3	589,3	$23^\circ 8'$
Tiogalat de argint, AgGaS_2 [100]	$\overline{4}2m$	497,4	522°
Tiogalat de cadmiu, CdGa_2S_4 { [100] [100]	$\overline{4}$	487,2	$17,3^\circ$ $11,6^\circ$
Sare Seignette, $\text{KNa}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	222	589,3	$-1,35^\circ$
$(\text{NH}_4)\text{Na}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	222	589,3	$+1,55^\circ$
Azotit de sodiu, NaNO_2	$mm2$	632,8	$+15,7^\circ$
Acid tartric, $\text{H}_2\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6$ (ambele axe optice)	2	589,3	$11,4^\circ$
Zahăr, $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ { I axă optică II axă optică	2	589,3	22° $-6,4^\circ$
Ramnoză, $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$ { I axă optică II axă optică	2	589,3	$+12,9^\circ$ $+5,4^\circ$

Să ne referim acum la cristalele fără centru de simetrie și la mediile ale căror grupuri de simetrie conțin operații de speța a doua. Unul dintre aceste grupuri, și anume ∞m , interzice existența direcțiilor elicoidale și, prin urmare, și activitatea optică. Într-adevăr, în acest caz, orice direcție se află într-unul dintre planurile de simetrie și, din această cauză, nu poate fi direcție elicoidală. Deoarece activitatea optică este dată de către un pseudotensor de rangul doi, teorema lui Hermann interzice activitatea optică și în cristalele din clasele $3m$, $4mm$, $6mm$, cu toate că în ele există direcții elicoidale. Din teorema lui Hermann rezultă și imposibilitatea activității optice în cristalele din clasele $\overline{6}$, $\overline{6}m2$ și $\overline{4}3m$: înlocuind în aceste clase axele de ordinul trei cu axe de ordin infinit, obținem clasele limită, fără centru de simetrie, ∞/m , ∞/mm și, respectiv, $\infty\infty/m$.

Așadar, numai patru clase, care au operații de speța a doua, permit activitatea optică: m , $mm2$, $\overline{4}$ și $\overline{4}2m$. Direcțiile care coincid cu axele $\overline{4}$, sau care se află în planurile de simetrie, nu sînt elicoidale. Într-adevăr, toate cristalele din aceste clase au planuri reciproc perpendiculare, care constau din direcțiile în care activitatea optică nu apare, pentru că simetria tensorului lor de rotație este $\overline{4}2m$. Oricare direcție elicoidală dreaptă, din cristalele de acest tip, este transformată prin operațiile de simetrie de speța a doua într-o direcție elicoidală stîngă și invers. Din aceasta cauză, direc-

țiile elicoidale drepte și stîngi, din aceste cristale, sînt, dacă ne putem exprima astfel, în cantități egale. Rotirea planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axei optice este posibilă numai în două clase de acest tip : m și $mm2$ și numai cu condiția ca axele optice să nu se afle în planurile de simetrie. În acest caz, mărimea rotației este la fel după ambele axe optice, dar sensurile lor sînt inverse unul față de altul. Figura 81.3 ilustrează

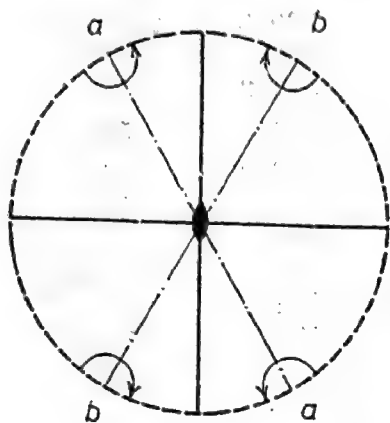


Fig. 81.3. Rotația planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axelor optice într-un cristal din clasa $mm2$. Proiecție stereografică. Cu liniuță și punct sînt trasate axele optice, cu săgeți rotunde în jurul lor — sensurile de rotație a planului de polarizare. După axa aa se observă rotația levogiră, după axa bb , rotația dextrogiră, de aceeași intensitate.

această concluzie pe exemplul rotațiilor planului de polarizare pentru cristalele din clasa $mm2$. Nu demult ea a fost observată într-un cristal de azotit de sodiu, care aparține acestei clase (Chern, Phillips, 1970) și în germanatul de zinc și sodiu, Na_2ZnGeO_4 , clasa m (Kozirev, Ghilvarg, Grecișnikov, Belov, 1973).

Dacă într-un cristal uniax al unei clase optic active, indicii de refracție N_o și N_e devin egali între ei pentru o anumită lungime de undă, atunci rotația planului de polarizare a luminii de această lungime de undă se poate produce în oricare dintre direcțiile pe care le permite simetria activității optice. Astfel, în cazul unui cristal de tiogalat de argint, $AgGaS_2$ (clasa $\bar{4}2m$) dubla refracție își schimbă semnul pentru lungimea de undă $\lambda = 4974 \text{ \AA}$. La această lungime de undă Hobden (Hobden, 1968) a observat rotația planului de polarizare; în cazul propagării luminii după axele cristalofizice X_1 și X_2 , rotația specifică are, după cum era de așteptat, semne opuse (v. fig. 44.4). Observații analoage au fost constatate și la cristalul de tiogalat de cadmiu (clasa $\bar{4}$); în figura 81.4 sînt date rezultatele acestor observații.

Să trecem la observarea părții antisimetrice a pseudotensorului de rotație, $G^{(a)}$. Un pseudotensor antisimetric de rangul doi este dual față de un vector polar obișnuit : $\epsilon \{V^2\} \sim V$; din această cauză, partea simetrică a pseudotensorului de rotație poate fi diferită de zero numai în cazul cristalelor a căror simetrie admite existența unui vector de material, adică în cazul cristalelor și texturilor care fac parte din clasele piroelectrice

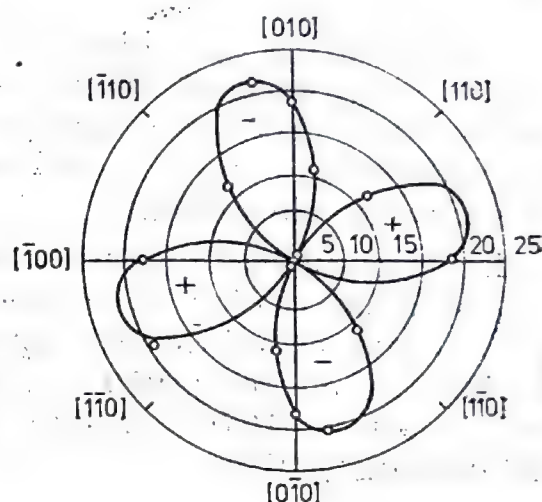
1, 2, 3, 4, 6, ∞ , m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$, ∞m .

Printre clasele enumerate, pe lângă clasele care admit activitatea optică în accepțiunea obișnuită, sînt și unele care nu o admit

$$3m, 4mm, 6mm, \infty m.$$

Cristalele și texturile unor asemenea clase sînt denumite materiale slab optic active; Agranovici și Ghinzburg (1965) utilizează termenul de *slab girotrope*. Pseudotensorii lor de rotație sînt antisimi-

Fig. 81.4. Rotația specifică a planului de polarizare pentru un cristal de tiogalat de cadmiu (clasa 4) în planul (001); se vede că pseudotensorul de rotație are simetria $\bar{4}2m$, însă axele sale de simetrie de ordinul doi nu coincid cu axele cristalofizice X_1 , adică $[100]$, și X_2 , adică $[010]$.



metrici. Caracterul polarizării luminii care se propagă prin cristalele slab optic active este în cel mai înalt grad original. Vectorii inducție electrică ai tuturor undelor luminoase, care se propagă prin asemenea cristale, sînt polarizați liniar. Dacă activitatea optică ar lipsi complet, atunci și vectorul intensitate a cîmpului electric al unei luminoase ar fi liniar polarizat (chiar dacă, în general, ar ieși din planul frontului de undă), astfel încît întreaga undă s-ar putea considera liniar polarizată. Din cauza că există activitatea optică, vectorul intensitate a cîmpului electric este legat de vectorul inducție electrică prin ecuațiile de material (81.7), care, în cazul unei activități slabe, capătă forma

$$\mathbf{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{D} + im\mathbf{h} \cdot \mathbf{D} \quad (81.25)$$

\mathbf{h} fiind vectorul dual al pseudotensorului antisimetric \mathbf{G}

$$G_{jk} = \delta_{jk} h_i, \quad h_i = \frac{1}{2} \delta_{ijk} G_{jk}; \quad (81.26)$$

în cristalele din categoria inferioară el este paralel cu axa optică. Pentru undele care se propagă de-a lungul axei optice și pentru toate undele ordinare în general, $\mathbf{h} \cdot \mathbf{D} = 0$, astfel încît vectorul \mathbf{E}

al undei ordinare este polarizat liniar. În cazul undei extraordinare însă, vectorul E este polarizat eliptic, elipsa găsiindu-se în planul care trece prin axa optică a cristalului și prin normala la undă, adică este perpendiculară pe frontul de undă. Așa și trebuie să fie : aceasta este singura formă de polarizare eliptică posibilă într-o direcție neelcoidală. Vectorul intensitate, E , devine de două ori pur longitudinal în decursul unei perioade, fiind totodată în aceste momente foarte mic ($E_{\text{long}} \sim hE_{\text{ampl}}$), corespunzător elipticității foarte mici (de ordinul lui h).

Activitatea slab optică a cristalelor a fost observată pentru prima dată, se pare, de Fiodorov (1959). Ea trebuie să apară la reflexia și la refracția luminii, întrucât condițiile la limită impun continuitatea componentei tangențiale a vectorului intensitate la suprafața de separație.

Remarcăm că noțiunile fundamentale ale teoriei activității optice a cristalelor și, în special, problema condițiilor la limită pînă în momentul de față constituie încă subiect de discuție — v., de pildă, Fiodorov (1959, a) ; Bokut, Serdiukov și Fiodorov (1970) ; Aleksandrov (1970) ; Bokut și Serdiukov (1971) ; Agranovici și Ghinzburg (1972).

§ 82. ACTIVITATEA OPTICĂ ARTIFICIALĂ

Prin activitate optică artificială (indusă) se înțelege apariția sau modificarea activității optice sub influența acțiunilor exterioare : a cîmpului electric sau a cîmpului magnetic, a tensiunilor mecanice etc. Nu demult, s-a observat efectul cîmpului electric asupra activității optice a cristalelor, prevăzută mai de mult (Jeludev, 1964) — efectul electrogirator (Vloh, 1971) (un fenomen asemănător în unii seignettoelectrici — variația semnelui activității optice la repolarizarea cristalului — a fost menționat de Șuvalov și Ivanov, 1964) : într-un cîmp electric de intensitate E , pseudotensorul de rotație al cristalului este egal cu

$$G_{ij}(E) = G_{ij}^{(0)} + A_{ijk} E_k + B_{ijkl} E_k E_l. \quad (82.1)$$

Simetria internă a pseudotensorului A este egală cu $\epsilon [V^2] V$ (neglijăm activitatea optică slabă). Acesta este un tensor de tip par (forma lui este dată în tabelul E.14) ; el coincide, pentru orice subsistem, cu forma tensorului $V [V^2]$ pentru clasa enantiomorfă a acestui subsistem (de comparat cu tabelul E.11). Cu toate că tensorilor de tip par nu le este proprie egalarea cu zero, acest tensor se anulează pentru două subsisteme : $\infty\infty m$ și $m3m$. Prin

urmă, în corpurile izotrope efectul electrogirator liniar nu este posibil. Printre clasele în care acest efect este posibil sînt multe în care activitatea optică este interzisă; evident, ele sînt cele mai comode pentru a-l observa.

Pseudotensorul \mathbf{B} , de simetrie internă $\varepsilon [V^2]^2$ este de tip impar; de aceea, în cristalele cu centru de simetrie nu este posibilă electrogirarea pătratică. Un tensor de aceeași formă descrie influența (pînă acum, se pare, neobservată) tensiunilor mecanice asupra activității optice (Ranganath, Ramaseshnan, 1969).

Activitatea optică artificială sub acțiunea unui cîmp magnetic este, dimpotrivă, posibilă și în corpurile izotrope, fiind cunoscută de mult timp. Încă din 1846 Faraday a descoperit că, dacă asupra unui corp transparent, optic izotrop, neactiv, supus unui cîmp magnetic, cade în direcția liniilor cîmpului magnetic o radiație luminoasă, liniar polarizată, atunci lumina emergentă este tot liniar polarizată, însă planul său de polarizare este rotit față de planul de polarizare al luminii incidente cu un unghi proporțional cu lungimea drumului luminii prin substanță și cu intensitatea cîmpului magnetic.

Activitatea optică Faraday se explică prin faptul că într-un cîmp magnetic tensorul impermitivității dielectrice a cristalelor (și al corpurilor izotrope) variază întrucîtva. Din termodinamica proceselor ireversibile rezultă că corecția complexă, $\Delta\eta = \zeta + i\xi$, la tensorul impermitivității dielectrice, determinată de un cîmp magnetic de intensitate \mathbf{H} , satisface relația

$$\Delta\eta_{jk}(\mathbf{H}) = \Delta\eta_{kj}(-\mathbf{H})$$

sau

$$\zeta_{jk}(\mathbf{H}) = \zeta_{kj}(-\mathbf{H}), \quad \xi_{jk}(\mathbf{H}) = \xi_{kj}(-\mathbf{H}). \quad (82.2)$$

Totodată, pentru cristalele transparente, această corecție (ca și întregul tensor η) este hermitică, adică partea lui reală este simetrică, iar cea imaginară, antisimetrică

$$\zeta_{jk}(\mathbf{H}) = \zeta_{kj}(\mathbf{H}), \quad \xi_{jk}(\mathbf{H}) = -\xi_{kj}(\mathbf{H}). \quad (82.3)$$

Comparînd condiția (82.2) cu (82.3) găsim că ζ sînt funcții pare, iar ξ sînt funcții impare de intensitatea cîmpului magnetic. În primă aproximație,

$$\zeta_{jk} = C_{jklm} H_l H_m, \quad \zeta = \mathbf{C} : \mathbf{H}\mathbf{H}; \quad (82.4)$$

$$\xi_{jk} = f_{jkl} H_l, \quad \xi = \mathbf{f} \cdot \mathbf{H}. \quad (82.5)$$

Tensorii C și f satisfac relațiile

$$C_{jklm} = C_{kjl m} = C_{j k m l} = C_{k j l m}, \quad (82.6)$$

$$f_{jkl} = -f_{kjl}. \quad (82.7)$$

Evident, cel mai important este efectul legat de corecția $i\mathbf{f} \cdot \mathbf{H}$ la tensorul impermitivității dielectrice, η , liniară în raport cu \mathbf{H} .

Să aplicăm relațiile de dualitate și să înlocuim pseudotensorul f , antisimetric în raport cu doi indici, cu tensorul de rangul doi, F

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \delta_{ijk} f_{jkl}, \quad f_{jkl} = \delta_{jkm} F_{ml}. \quad (82.8)$$

Atunci, în loc de (82.5), obținem

$$\xi_{jk} = \delta_{jkl} F_{lm} H_m, \quad \xi = \mathbf{I} \times \mathbf{F} \cdot \mathbf{H}, \quad (82.9)$$

deci componentele tensorului impermitivității dielectrice, modificat de câmpul magnetic, dacă se ține cont numai de termenii liniari ai dezvoltării în \mathbf{H} , sînt egale cu $\eta + i\mathbf{I} \times \mathbf{F} \cdot \mathbf{H}$, iar relația care leagă între ele intensitatea și inducția câmpului electric ale unei luminoase, care se propagă printr-un cristal ce se află în câmp magnetic, capătă forma

$$E_j = (\eta_{jk} + i\delta_{jkl} F_{lm} H_m) D_k, \quad \mathbf{E} = \eta \cdot \mathbf{D} + i\mathbf{D} \times \mathbf{F} \cdot \mathbf{H}. \quad (82.10)$$

Ea amintește foarte mult de ecuația de material a unui mediu optic activ, (81.7), și ar coincide total cu ea, dacă vectorii axiali $\mathbf{F} \cdot \mathbf{H}$ și $\mathbf{G} \cdot \mathbf{m}$ ar fi identici. Mărimii $\mathbf{m} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{m}$, care caracterizează cantitativ activitatea optică în direcția \mathbf{m} , îi corespunde pseudo-scalarul $\mathbf{m} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{H}$.

Așadar, un mediu transparent — izotrop sau anizotrop — în câmp magnetic devine optic activ: undele luminoase care se propagă prin el sînt polarizate eliptic sau circular. Acesta este tocmai *efectul Faraday*. În general el este foarte slab — de obicei mult mai slab decît activitatea optică naturală, astfel încît poate fi observat numai în mediile optic izotrope sau în cazul în care lumina se propagă de-a lungul axei optice a cristalului. În acest caz, activitatea optică artificială provocată de câmpul magnetic se manifestă prin rotația planului de polarizare: planul de polarizare

al luminii polarizate liniar, trecînd printr-un strat de grosime d , se rotește față de direcția sa inițială cu unghiul

$$\psi = \frac{\pi n_o^3 d}{\lambda_0} F_{ii} m_i H_i = \frac{\pi n_o^3 d}{\lambda_0} \mathbf{m} \cdot \mathbf{F} \cdot \mathbf{H} \quad (82.11)$$

în sensul rotației acelor de ceas. Aici n_o este indicele de refracție al undelor care se propagă după axa optică, λ_0 este lungimea de undă a luminii în vid, \mathbf{m} — vectorul unitate al normalei de undă, \mathbf{F} — tensorul coeficienților *Faraday*, iar \mathbf{H} — intensitatea cîmpului magnetic.

Dacă mediul este optic izotrop, $F_{ii} = F\delta_{ii}$, iar rotirea *Faraday* a planului de polarizare este caracterizată de *constanta Verdet*,

$$V = \pi n^3 F / \lambda_0;$$

în cazul substanțelor nemagnetice (sticlă, apă, sulfură de carbon) ea este de ordinul unei secunde de arc pe Oersted \times centimetru. În substanțele magnetice efectul este mult mai însemnat; el este proporțional, în acest caz, nu cu intensitatea cîmpului magnetic, ci cu magnetizarea materialului.

Asupra luminii care se propagă într-o direcție \mathbf{m} , care este perpendiculară pe vectorul axial $\mathbf{F} \cdot \mathbf{H}$, cîmpul magnetic nu are, în primă aproximație, nici o influență; în acest caz, trebuie să se țină cont de corecțiile pătratică în raport cu \mathbf{H} ale componentelor tensorului impermitivității dielectrice, determinate de formula (82.4). Tensorul

$$\zeta = \mathbf{C} : \mathbf{H}\mathbf{H}$$

este real și simetric; el descrie dubla refracție artificială: fie în formă pură, dacă direcția de propagare a luminii coincide cu axa optică a cristalului, fie, în caz contrar, pe fondul dublei refracții naturale, care este cu mult mai intensă. Acesta este *efectul Cotton-Mouton*, complet analog efectului Kerr, studiat în § 77, însă mult mai slab (excepție fac cristalele fero- și antiferomagnetice — v. Smolenski, Pisarev, Sini, Kolpakova, Titova, 1972). \mathbf{C} este *tensorul Cotton-Mouton*, de simetrie internă $[V^2]^2$.

Capacitatea unei substanțe de a căpăta în cîmp magnetic activitate optică se caracterizează prin tensorul de material \mathbf{F} . Deoarece această proprietate o prezintă și substanțele care au un centru de simetrie (în particular izotrope), adică fără structură magnetică, tensorul *Faraday*, \mathbf{F} , este de tip par. Rezultă deci că $\mathbf{F} \cdot \mathbf{H}$ este un vector de tip magnetic, adică este un vector axial,

care își inversează sensul la inversia timpului. Deoarece vectorul normalei de undă, m , la inversia timpului își inversează și el sensul, $m \cdot F \cdot H$ este, ca și $m \cdot G \cdot m$ un pseudotensor de tip electric, adică de simetrie $\infty\infty 1'$ (v. § 68) (pentru amănunte asupra tensorului Faraday, v. Ranganath, 1972).



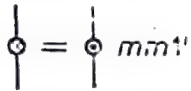




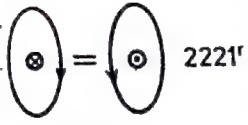
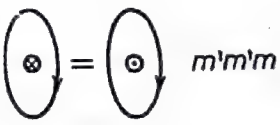
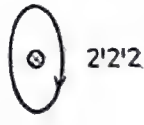
Activitatea optică Faraday diferă ca simetrie substanțial de activitatea optică naturală. În timp ce activitatea optică naturală se produce numai în direcțiile elicoidale, activitatea optică Faraday este posibilă și în direcții neelicoidale. Într-adevăr, un corp cu centru de simetrie rămâne la fel și în câmp magnetic, pentru că și câmpul magnetic are centru de simetrie; deci în acesta nu există direcții elicoidale și, în ciuda acestui fapt, rotirea planului de polarizare se produce. În cristale și în corpurile izotrope, introduse în câmp magnetic, toate direcțiile pentru care componenta normală a vectorului axial $F \cdot H$ este diferită de zero, sînt direcții axiale (v. §§ 14, 44 și anexa C). După aceste direcții se deosebesc nu vitezele undelor polarizate dextrogir și levogir, ci vitezele undelor pentru care sensul de parcurgere a cercului sau elipsei de polarizare coincide cu sensul vectorului axial sau este opus lui. Prin urmare, în cadrul activității optice naturale, a electrogirației sau a ipoteticei piezogirației birefringența circulară (sau eliptică) este *elicoidală*, pe cînd în cazul efectului Faraday, în mediile optice inactive aceasta este *axială*. Deosebirea dintre aceste două tipuri apare clar în evidență dacă lumina care a traversat mediul activ este reflectată pe o oglindă pentru a o dirija pe drumul pe care l-a parcurs, dar de data aceasta în sens invers. Prin reflexie sensul propagării elicoidale a luminii se inversează (lumina polarizată drept se transformă în lumină polarizată stîng), orientarea axială rămînînd însă neschimbată. Din această cauză, dacă dubla refracție circulară sau eliptică este de tip elicoidal, atunci diferența de drum căpătată de cele două unde în sensul direct de propagare a luminii se anulează prin propagarea în sens invers; dimpotrivă, în cazul dublei refracții de tipul axial diferența de drum cînd lumina se propagă în sensul invers continuă să crească, ceea ce face posibilă utilizarea reflexiei multiple pentru amplificarea efectului.

Termenul „axială” nu poate fi însă luat ad literam. Dacă problema ar consta numai în axialitatea direcției, atunci dubla refracție circulară de tip axial s-ar observa la propagarea luminii după axele optice ale cristalelor claselor centrale din categoria medie ($\bar{3}$, $4/m$, $6/m$), în absența câmpului magnetic, ceea ce însă nu se observă în realitate, în aceste condiții. Din interpretarea efectului Faraday rezultă clar că drept direcții de dublă refracție circulară sau eliptică, de tip axial, pot servi numai direcțiile axiale magnetice, adică direcțiile a căror simetrie nu depășește ∞/mm' .

O asemenea disimetrie a direcției este posibilă nu numai într-un mediu nemagnetic sub acțiunea unui câmp magnetic exterior, ci și în cristalele feromagnetice (v. § 70). Din această cauză, în continuare, activitatea optică Faraday (axială) se tratează fără a ține seama dacă este artificială sau naturală. Cu toate că explicația activității optice Faraday a cristalelor feromagnetice (v. Krincik și Cetkin, 1969) se deosebește întrucâtva de explicația efectului Faraday, expusă mai sus, în ambele cazuri simetria este asemănătoare.

Tabelul 82.1

Proprietățile optice ale direcțiilor, reprezentarea lor simbolică și simetria lor

Natura luminii ce se propagă în direcția dată	La schimbarea direcției de propagare, viteza luminii		
	nu se modifică		se modifică
	pentru lumina cu o anumită orientare elicoidală	pentru lumina cu o anumită orientare axială	
lumină naturală			
polarizată liniar			
polarizată circular			
polarizată eliptic			

Toate cazurile logic posibile ale proprietăților optice ale direcțiilor sint grupate în tabelul 82.1. Pe lângă direcțiile deja cunoscute ale dublei refracții circulare de tip elicoidal (simetrie $\infty 21'$) și axial (∞/mm'), în tabel mai este dat încă un tip de direcții, în care nu există nici dublă refracție elicoidală, nici dublă refracție axial-circulară, însă după care lumina se propagă cu viteze diferite în sensul direct și în sensul invers. Operațiile care intră în grupul ei de simetrie $\infty/m'm$ transformă șurubul drept în șurub sting precum și o orientare axială în alta, fără a modifica însă direcția de propagare. Disimetria necesară pentru dubla refracție liniară este studiată în § 25 (acolo ea se numește pur și simplu dublă refracție). Combinarea disimetriilor necesare pentru dubla refracție liniară și pentru cea circulară de un anumit tip duce la dubla refracție eliptică de tipul respectiv. Tabelul 82.1 permite determinarea proprietăților

optice ale oricărei direcții din orice cristal. Pentru aceasta este necesar să se găsească grupul de simetrie magnetică a direcției date

$$G_{dir} = G \cap \infty/mm1', \quad (82.12)$$

G fiind grupul de simetrie magnetică a cristalului, iar axa ∞ este paralelă cu direcția care ne interesează pe noi. Dacă cristalul este supus acțiunilor exterioare — tensiunii uniaxiale, cîmpului electric sau magnetic — atunci în relația (82.12), în loc de G trebuie să punem pe

$$G_{cr, solicit} = G \cap G_{solicit}, \quad (82.13)$$

în care $G_{solicit}$ este grupul de simetrie magnetică al solicitării: $\infty/mm1'$, $\infty m1'$ sau ∞/mm' , respectiv. În continuare trebuie determinat care dintre cele zece grupuri de simetrie magnetică, G_{optice} date în tabelul 82.1 sînt supragrupuri ale grupului de simetrie al direcției determinate din formula (82.12)

$$G_{optice} \supseteq G_{dir} \quad (82.14)$$

și să se determine care dintre ele este cel inferior — el va determina tocmai simetria proprietăților optice ale direcției date. Pentru aceasta se poate utiliza schema de subordonare reciprocă a acestor grupuri — figura 82.1. Ca de obicei, interzicerea efectului are un caracter absolut, însă din faptul că el este permis, încă nu rezultă nicidecum că el se produce cu adevărat. În orice caz, pentru cristalele transparente, cu ordonare magnetică, ne putem aștepta la proprietăți optice extrem de neașteptate; unele dintre ele sînt date în tabelul prezentat, însă pînă acum probabil că nu au fost încă observate.

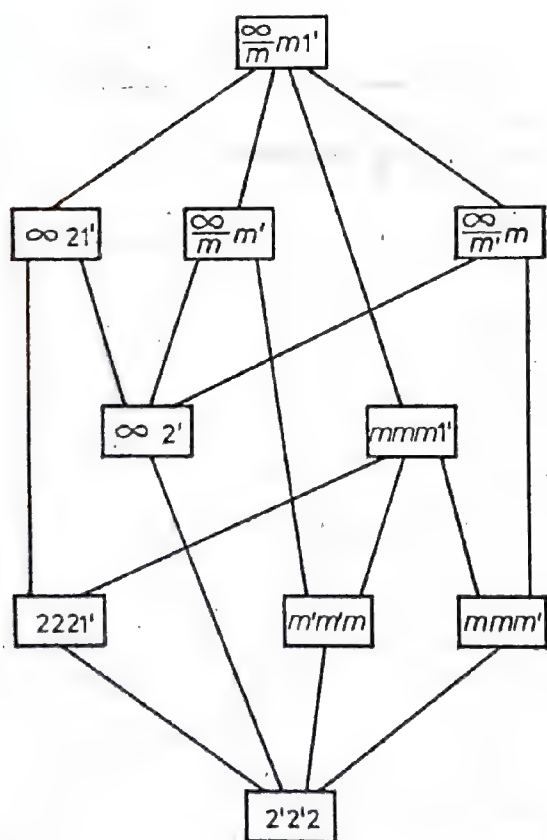


Fig. 82.1. Schema subordonării reciproce a grupurilor de simetrie ale proprietăților optice ale direcțiilor.

§ 83. ACTIVITATEA ACUSTICĂ A CRISTALELOR

Efectul dispersiei spațiale asupra propagării undelor elastice în cristalele fără centru de simetrie și în corpurile girotropice determină *activitatea acustică* — analogul acustic al activității optice (Andronov, 1960). Legea generalizată a lui Hooke, (51.3), când se ia în considerație dispersia spațială, capătă, în primă aproximație, forma

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} + b_{ijkln} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_n}. \quad (83.1)$$

Tensorul rotațiilor acustice, b , care caracterizează dispersia spațială a proprietăților elastice ale unui cristal, la fel ca și c , este simetric în raport cu prima pereche de indici (ij) și cu cea de a doua (kl); aceasta ne permite să transcriem (83.1) în forma

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + b_{ijkln} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l \partial x_n} \quad (83.2)$$

(de comparat cu trecerea de la formula (51.3) la formula (51.13)). Plecînd de la aceasta, găsim modificarea ecuațiilor elastodinamicii (51.14), datorită luării în considerare a dispersiei spațiale

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l \partial x_i} + b_{ijkln} \frac{\partial^3 u_k}{\partial x_l \partial x_i \partial x_n} = \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}. \quad (83.3)$$

Pentru undele plane,

$$u = A p \exp [(2\pi i/\lambda) (m \cdot r - vt)],$$

iar ecuațiile (83.3) au forma

$$[c_{ijkl} m_i m_l + (2\pi i/\lambda) b_{ijkln} m_i m_l m_n] p_k = \rho v^2 p_j, \quad (83.4)$$

$$[m \cdot c \cdot m + (2\pi i/\lambda) m \cdot b : mm] \cdot p = \rho v^2 p.$$

Acestea nu sînt altceva decît ecuațiile lui Christoffel pentru cristalele acustic active. Ele arată că în acustica cristalelor, ca și în teoria activității optice, dispersia spațială duce, în primă aproximație, la apariția unei corecții pur imaginare pentru tensorul

c, iar absența absorbției exprimă faptul că tensorul complex $c_{\lambda\mu} + (2\pi i/\lambda)b_{\lambda\mu n}m_n$ este hermitic, deci partea sa imaginară este antisimetrică

$$b_{\lambda\mu n} = -b_{\mu\lambda n}.$$

Prin urmare, simetria internă a tensorului b este $\{[V^2]^2\}V$. Întrucît în ecuația fundamentală (83.4) tensorul b intră sub forma $m \cdot b : mm$, cea mai importantă este partea lui simetrică în raport cu primul, cu al patrulea și cu al cincilea indice — *tensorul simetrizat al rotației acustice*. Pentru el faptul că este antisimetric în raport cu permutarea primei și celei de a doua perechi de indici se reduce la a fi antisimetric în raport cu al doilea și al treilea indice, astfel încît simetria sa internă va fi egală cu $\{V^2\}\{V^3\}$. Utilizînd relația de dualitate, $\{V^2\}\{V^3\} \sim \epsilon V[V^3]$, aceasta permite introducerea *pseudotensorului de rotație acustică*, g

$$g_{stln} = \frac{\pi}{\lambda} \delta_{sjk} b_{ijkln}. \quad (83.5)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} b_{ijkln} = \delta_{jks} g_{stln}.$$

Prin intermediul pseudotensorului g se definește *vectorul axial al rotației acustice*, care depinde de direcția normalei de undă, m ,

$$Q = g : mmm, \quad Q_s = g_{stln} m_t m_l m_n. \quad (83.6)$$

Acesta, împreună cu tensorul lui Christoffel,

$$M = m \cdot c \cdot m,$$

introdus în § 56, permit aducerea ecuației Christoffel, (83.4), la următoarea formă finală

$$(M_{jk} + i\delta_{jkl} Q_l)p_k = \rho v^2 p_j, \quad (83.7)$$

$$M \cdot p + ip \times Q = \rho v^2 p.$$

Așadar, pseudotensorul rotației acustice, g , de simetrie internă $\epsilon V[V^3]$, determină, de fapt, în cea mai mare parte, activitatea acustică a cristalelor. În cazul general (adică pentru crista-

lele din clasa 1) el are 30 de componente independente, pe cînd în cazul tensorului b , de simetrie $\{[V^2]^2\} V$, care descrie activitatea acustică în mod complet, numărul lor este 45.

Pseudotensorii de material $\varepsilon V [V^3]$ nu sînt dați în anexa E (pentru grupurile cristalografice, care constau numai din operații de speța întâi, forma pseudotensorilor $\varepsilon V [V^3]$ coincide cu forma tensorilor $V [V^3]$, dați în tabelul E.17; pseudotensorul de rangul patru, de formă generală, a fost studiat de Barkovski, 1970). Forma acestor pseudotensori pentru toate clasele cristaline fără centru de simetrie o putem obține prin descompunerea lor în părți ireductibile (v. § 52) — metode ce se bazează pe teoria reprezentărilor grupurilor. Vom reprezenta pseudotensorul g sub forma

$$g = g^{(4)} + g^{(31)}; \quad (83.8)$$

$$g_{ijkl}^{(4)} = g_{(ijkl)}, \quad g_{ijkl}^{(31)} = g_{ijll} - g_{(ij)ll};$$

prin urmare, pseudotensorul $g^{(4)}$ este simetric în raport cu toți indicii, pe cînd $g^{(31)}$ numai în raport cu ultimii trei indici, iar în cazul simetrizării în raport cu toți indicii el se anulează.

Se poate arăta (pentru aceasta este necesară teoria reprezentărilor) că pseudotensorul $g^{(4)}$ constă din părți care se transformă ca pseudotensorul \tilde{I} , pseudodeviatorul \tilde{D} și pseudononorul \tilde{N} , iar $g^{(31)}$ din părți care se transformă ca vectorul V , pseudodeviatorul \tilde{D} și septorul \tilde{S} . Dintre aceste mărimi, tensorii de simetrii interne ca $g^{(4)}$ și $g^{(31)}$ se constituie, cu o precizie de pînă la niște coeficienți numerici, univoc, și anume

$$g_{ijkl} = \tilde{I}^{(4)} \delta_{(ij} \delta_{kl)} + \tilde{D}_{(ij}^{(4)} \delta_{kl)} + \tilde{N}_{ijkl}^{(4)} + \quad (83.9)$$

$$+ \delta_{n(ij} \delta_{kl)} V_n^{(31)} + (\tilde{D}_i^{(31)} \delta_{kl)} - \tilde{D}_{(ij}^{(31)} \delta_{kl)} + \delta_{n(ij} \tilde{S}_{kl)n}^{(31)}.$$

Aici indicii superiori arată că termenul dat aparține de tensorul $g^{(4)}$ sau $g^{(31)}$ al dezvoltării. Înlocuind în această dezvoltare formele generale ale tensorilor ireductibili, invariante față de grupurile cristalografice (v. tab. 47.3), obținem forma generală a pseudotensorilor g pentru grupurile respective.

Substituind dezvoltarea (83.9) și (83.6), găsim forma generală pentru vectorul axial al girației acustice

$$Q_i = \tilde{I}^{(4)} m_i + \delta_{ijn} m_j V_n^{(31)} + \frac{1}{2} (\tilde{D}_{ij}^{(4)} + \tilde{D}_{ij}^{(31)}) m_j + \quad (83.10)$$

$$+ \frac{1}{2} (\tilde{D}_{kl}^{(4)} - \tilde{D}_{kl}^{(31)}) m_i m_k m_l + \delta_{ijn} \tilde{S}_{kl n}^{(31)} m_j m_k m_l + \tilde{N}_{ijkl}^{(4)} m_j m_k m_l,$$

$$Q = \tilde{I}^{(4)} m + m \times I^{(31)} + \frac{1}{2} (\tilde{D}^{(4)} + \tilde{D}^{(31)}) \cdot m + \\ + \frac{1}{2} [m \cdot (\tilde{D}^{(4)} - D^{(31)}) \cdot m] m + m \times S^{(31)} : mm + N^{(4)} : mmm.$$

Folosind formula (83.10), se poate găsi vectorul Q pentru orice clasă cristalografică fără centru de simetrie și pentru orice direcție a normalei de undă, m , și forma sistemului de ecuații Christoffel, (83.7). Pentru a-l rezolva, vom considera că problema corespunzătoare a acusticii cristalelor, cînd nu se ține cont de activitatea acustică, este deja rezolvată, cu alte cuvinte, că ne sînt cunoscute vitezele v_{0i} și vectorii de material ai polarizării, $p^{(0i)}$, pentru undele elastice, care satisfac ecuațiile

$$M \cdot p = \rho v^2 p$$

și vom determina cum se modifică aceștia sub influența activității acustice a cristalului.

Vom examina mai întii cazul în care normala de undă, m , nu este axă acustică a cristalului. Într-un sistem de coordonate construit pe vectorii p^{0i} , sistemul (83.7) capătă forma

$$\begin{aligned} \rho(v_{01}^2 - v^2) p_1 + iQ_3 p_2 - iQ_2 p_3 &= 0, \\ -iQ_3 p_1 + \rho(v_{02}^2 - v^2) p_2 + iQ_1 p_3 &= 0, \\ iQ_2 p_1 - iQ_1 p_3 + \rho(v_{03}^2 - v^2) p_3 &= 0. \end{aligned} \quad (83.11)$$

Raportul $Q/(\rho v^2)$ este totdeauna mic (de ordinul lui a/λ , unde a este parametrul rețelei, λ fiind lungimea de undă); vom considera însă că sînt mici și rapoartele de tipul $Q/[\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)]$, pentru aceasta fiind necesar ca normala de undă să fie suficient de îndepărtată de axa acustică. În aceste condiții sistemul (83.11) poate fi rezolvat prin metodele calculului aproximativ. Ele dau

$$v_1^2 = v_{01}^2 - \frac{Q_2^2}{\rho^2(v_{03}^2 - v_{01}^2)} - \frac{Q_3^2}{\rho^2(v_{03}^2 - v_{01}^2)}, \quad (83.12)$$

$$p^{(1)} = p^{(01)} + \frac{iQ_3}{\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)} p^{(02)} - \frac{iQ_2}{\rho(v_{03}^2 - v_{01}^2)} p^{(03)}. \quad (83.13)$$

Prin permutări ciclice, din (83.12) obținem pe v_2 și pe v_3 , iar din (83.13), pe $p^{(2)}$ și pe $p^{(3)}$. Compararea acestor formule cu formulele corespunzătoare ale teoriei activității optice a cristalelor — (81.13) și (81.16) — arată că fenomenul studiat amintește foarte mult de propagarea luminii într-un cristal optic activ după o direcție suficient de îndepărtată de axa optică (când $n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2} \gg |G_{33}|$). Activitatea acustică se manifestă și prin faptul că polarizarea undelor în loc de liniară devine eliptică, elipticitatea fiind mică — ordinul de mărime al raportului dintre parametrul ce caracterizează activitatea și parametrul care caracterizează anizotropia este egal cu $G_{33}/(n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})$, în teoria activității optice, și cu $Q_3/[\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)]$, în teoria activității acustice. Variația vitezei determinată de activitate este însă în ambele cazuri proporțională cu produsul dintre acest raport și parametrul de activitate, adică este cu două ordine de mărime mai mic.

Este interesant un caz particular al formulei (83.13), când unul dintre vectorii $p^{(0)}$ coincide cu normala de undă, adică dacă nu s-ar lua în considerare activitatea acustică, unda ar fi longitudinală. Atunci axa mare a elipsei vibrațiilor este orientată după normala de undă, iar cea mică se află în planul frontului de undă (de comparat cu elipsa vibrațiilor vectorului E , în cazul activității optice slabe, §81). Această situație se realizează, probabil, aproape pe toate normalele longitudinale din cristalele clasei 1: pe de-o parte, conform teoremei lui F. I. Fiodorov (§ 56) fiecare asemenea cristal are cel puțin două normale longitudinale, $m^{(1)}$, pe de altă parte, nu există nici o bază să ne așteptăm ca $Q(m^{(1)}) \parallel m^{(1)}$.

Activitatea acustică, la fel cu cea optică, se manifestă cel mai pregnant la propagarea undei elastice după una dintre axele acustice ale cristalului. Pentru analizarea ecuațiilor Christoffel, (83.7), de această dată le vom raporta la un sistem de coordonate ai cărui doi versori, e_1 și e_2 , se află în planul vectorilor proprii ai tensorilor M , iar drept al treilea versor servește vectorul propriu izolat, $p^{(00)}$, al tensorului M , și anume, versorii e_1 și e_2 îi vom lua astfel încât să devină zero componenta Q_2 a vectorului Q

$$\begin{aligned} \rho(v_{01}^2 - v^2) p_1 + iQ_3 p_2 &= 0, \\ -iQ_3 p_1 + \rho(v_{01}^2 - v^2) p_2 + iQ_1 p_3 &= 0, \\ -iQ_1 p_2 + \rho(v_{00}^2 - v^2) p_3 &= 0. \end{aligned} \quad (83.14)$$

Undei care are viteza v_{00} , iar polarizarea $p^{(00)}$, când se ține cont de activitatea acustică, îi corespunde o undă polarizată eliptic cu

elipticitatea mică; viteza ei, v_0 , și vectorul de polarizare, $\mathbf{p}^{(0)}$, se calculează după formulele

$$v_0^2 = v_{00}^2 - \frac{Q_1^2}{\rho^2(v_{01}^2 - v_{00}^2)}, \quad (83.15)$$

$$\mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{p}^{(00)} - \frac{iQ_1}{\rho^2(v_{01}^2 - v_{00}^2)} \mathbf{e}_2. \quad (83.16)$$

Mulțimii de unde care se propagă cu viteza v_{01} și care sînt polarizate în direcțiile $\mathbf{p}^{(0)}$, cînd se ține cont de activitatea acoustică, le corespund însă două unde, polarizate aproape circular; vitezele lor, v_1 și v_2 , și polarizările $\mathbf{p}^{(1)}$ și $\mathbf{p}^{(2)}$, sînt date de formulele

$$v_{1,2}^2 = v_{01}^2 \pm \frac{Q_3}{\rho} - \frac{Q_1^2}{2\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)}, \quad (83.17)$$

$$\mathbf{p}^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\mathbf{e}_1 \mp i \left(1 \mp \left(\frac{Q_1^2}{2Q_3\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)} \right) \mathbf{e}_2 \pm \frac{Q_1}{\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)} \mathbf{p}^{(00)} \right) \right]. \quad (83.18)$$

Și în acest caz, pentru evaluarea corectă a termenilor de ordinul întâi de mărime din cadrul vectorilor de polarizare, trebuie să se ia în considerație termenii cu două ordine de mărime mai mici în expresiile pentru viteze.

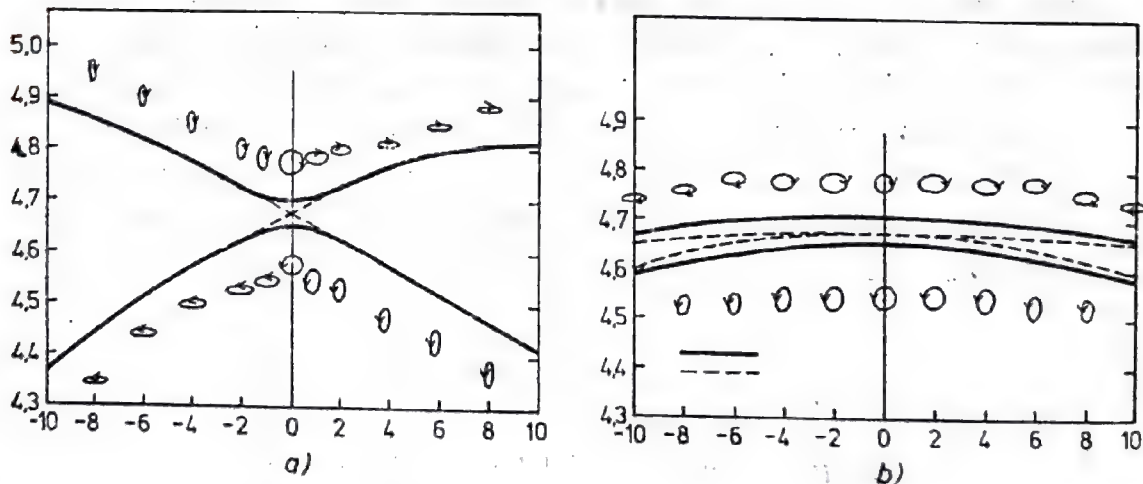


Fig. 83.1. Suprafețele vitezelor normale ale undelor elastice transversale, de frecvență 28,9 GHz și polarizarea lor în apropierea axei X_3 : în cuarț α , b) în cuarț α convențional. Pe axa absciselor sînt luate unghiurile măsurate de la axa X_3 spre axa X_2 (în grade); pe axa ordonatelor — vitezele în km/s. Pe elipsele de polarizare direcția orizontală este paralelă cu axa X_2 , cea verticală, cu axa X_1 . Linile punctate sînt aceleași fragmente ale suprafețelor pentru unde de frecvență mai joasă (Pine, 1971).

După cum rezultă din formulele (83.17), activitatea acustică a cristalelor, la fel cu cea optică, duce la întreruperea suprafețelor vitezelor normale în punctele de ieșire a axelor optice. Acest fapt se vede, în particular, în figura 83.1.

Așa cum s-a remarcat în § 56, toate axele de simetrie de ordin mai înalt decât doi sînt axe acustice longitudinale. Dacă pentru direcția m a unei asemenea axe pseudotensorul de rotație acustică, $Q(m)$, este diferit de zero, el este, evident, paralel cu ea

$$Q(m) = Qm.$$

În acest caz, situația se simplifică foarte mult: unda longitudinală în general nu se modifică ($v_0 = v_{00}$, $p^{(0)} = p^{(00)}$), iar undele transversale sînt polarizate strict circular

$$v_{1,2}^2 = v_{01}^2 \pm \frac{Q}{\rho}, \quad (83.19)$$

$$p^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e, \mp e_2). \quad (83.20)$$

Prin urmare, aici se observă rotația planului de polarizare a undelor elastice transversale. În acest caz, rotația specifică a planului de polarizare este egală cu

$$\alpha = \frac{Q\omega}{2\rho v_{01}^3}. \quad (83.21)$$

Deoarece direcțiile cele mai bune pentru observarea activității optice a cristalelor sînt axele acustice, o importanță deosebită o capătă mărimea vectorului rotație acustică în direcțiile acestor axe. În legătură cu aceasta vom menționa că în cazul cristalelor din clasa $\bar{4}3m$, în direcțiile axelor acustice $\langle 100 \rangle$ și $\langle 111 \rangle$, vectorul $Q(m)$ devine zero, deoarece aceste direcții se află în planurile de simetrie.

Polarizarea undelor elastice transversale, care se propagă în cristalele de cuarț α și β (clasele 32 și, respectiv, 622) de-a lungul axei principale de simetrie și în direcții apropiate de ea, precum și forma sectoarelor corespunzătoare ale suprafețelor vitezelor normale ale acestor cristale sînt date în figura 83.1 (pentru cuarțul β calculul este făcut convențional: s-au utilizat datele pentru cuarțul α , însă coeficientul c_{14} s-a luat egal cu zero).

Activitatea acustică a cristalelor, ca și cea optică, se exprimă cu ajutorul unui parametru adimensional, a/λ , care este raportul dintre constanta rețelei și lungimea de undă. De aceea, efectele remarcabile ale activității acustice se pot obține cu unde elastice hiperacustice, de lungime de undă de ordinul micrometrului și frecvență de ordinul gigahertzului (Lemanov și Smolenski, 1972). Studiul împrăstierii Mandelștan-Brilloiun a luminii pe undele hipersonore, polarizate circular, de frecvență 28,9 GHz, care se propagă de-a lungul axei de simetrie, într-un cristal de cuarț, a permis determinarea rotației specifice a planului de polarizare a hipersunetului — la această frecvență ea a fost de $1,06 \cdot 10^5$ grad/cm (Pine, 1971). Nu este greu deci să se determine componentele tensorilor care caracterizează activitatea acustică a cuarțului: $g_{3333} = 5,58 \cdot 10^9$ dyn/cm², $b_{31233} = 1,44 \cdot 10^4$ dyn/cm. Pentru comparația cu activitatea optică, este nimerit să se treacă la alte mărimi: confruntarea formulelor (81.24) și (83.21) arată că raportul $g_{3333}/\rho v^2 = 9,57 \cdot 10^{-3}$ este analog produsului $n_0^2 G_{33}$, raportul $b_{31233}/\rho v^2 = 247$ pm — cu produsul $n_0^2 \gamma_{123}$, în fine, raportul $g_{3333}\lambda/a\rho v^2 = 2,88$ — cu parametrul $n_0^2 G_{33}\lambda/a$. Prin urmare, prin compararea acestor mărimi cu valorile G_{33} , γ_{123} și $G_{33}\lambda/a$, date în tabelul 81.2, ultimele trebuie să fie înmulțite cu $n_0^2 \approx 2,4$. Însă și după aceasta se vede că activitatea acustică se manifestă în cuarț aproape de 100 de ori mai intens decât cea optică.

UNELE PROBLEME GENERALE ALE FIZICII CRISTALELOR

§ 84. SARCINILE EXPERIMENTALE ALE FIZICII CRISTALELOR

Printre problemele fizicii teoretice a cristalelor, ce trebuie rezolvate, un loc important îl ocupă determinarea direcțiilor în care o anumită proprietate a unui cristal capătă valoarea maximă sau valoarea minimă. Astfel de probleme apar în toate domeniile fizicii cristalelor; însă pentru a ne da seama de metodele lor de rezolvare este suficient să ne mărginim numai la o singură proprietate oarecare. În acest scop, aici vor fi studiate trei probleme din teoria efectului piezoelectric.

P r o b l e m a 1. Cum va trebui să fie tăiată o lamă dintr-un anumit cristal piezoelectric, astfel încât densitatea de sarcină, care apare pe armăturile sale scurtcircuitate, sub acțiunea unei tensiuni uniaxiale, perpendiculară la planul lamei, să fie maximă? Să se considere cazurile: a) un cristal de cuarț (clasa 32); b) un cristal din clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală, $\bar{4}3m$; c) un cristal sau o textură din clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală ∞m .

S o l u Ț i e. Teoria generală. După cum s-a arătat în § 59, densitatea de sarcină este proporțională, în aceste condiții, cu o expresie de gradul trei, M , în funcție de componentele vectorului unitar al normalei la lamă, n

$$M(n) = f : nnn = f_{ijk} n_i n_j n_k, \quad (84.1)$$

unde f este tensorul efectului piezoelectric longitudinal (v. § 58). Trebuie determinați vectorii n , unitari, adică cei care satisfac condiția

$$\Phi(n) = n \cdot n - 1 = 0, \quad (84.2)$$

și astfel încât funcția $M(n)$ să fie extremală.

Pentru rezolvarea problemei, vom forma funcția

$$F = M - \frac{3}{2} \lambda \Phi,$$

în care λ este multiplicatorul lui Lagrange, deocamdată nedeterminat, iar coeficientul $3/2$ se adaugă pentru simplificarea calculelor ulterioare. Valorile căutate ale componentelor n_i și ale multiplicatorului se determină ca soluții ale unui sistem care constă din patru ecuații : ecuația (84.2) și cele trei ecuații corespunzătoare ecuației vectoriale $\partial F / \partial \mathbf{n} = 0$. Ultima ecuație poate fi scrisă sub forma

$$\mathbf{f} : \mathbf{n} \mathbf{n} - \lambda \mathbf{n} = 0, \quad f_{ikl} n_k n_l - \lambda n_i = 0. \quad (84.3)$$

Înmulțind scalar ambele părți ale ecuației (84.3) cu \mathbf{n} , obținem

$$\lambda = \mathbf{f} : \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} = f_{ikl} n_i n_k n_l. \quad (84.4)$$

Evident, aici n_i este o componentă a unuia dintre vectorii $\mathbf{n}^{(s)}$, pentru care funcția $M(\mathbf{n})$ atinge valoarea extremă (sau cel puțin staționară), $\lambda_{(s)} = M(\mathbf{n}^{(s)})$.

În continuare efectuăm calculele pentru cazuri separate concrete.

Soluția problemei 1 a. Vom înlocui în ecuația (84.3) componentele care sînt diferite de zero ale tensorului efectului piezoelectric longitudinal, pentru cristalele din clasa 32 (conform tabelului 58.2). Notînd

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221} = f$$

obținem

$$f(n_1^2 - n_2^2) - \lambda n_1 = 0, \quad (84.5, a)$$

$$-2f n_1 n_2 - \lambda n_2 = 0, \quad (84.5, b)$$

$$-\lambda n_3 = 0. \quad (84.5, c)$$

Formula (84.4) capătă forma

$$\lambda = f n_1 (n_1^2 - 3n_2^2).$$

Vom începe rezolvarea sistemului (84.5) cu ecuația (84.5, c). Evident că sau $\lambda = 0$, sau $n_3 = 0$. În primul caz, din (84.5, a) rezultă $n_1^2 = n_2^2$, ceea ce este comparabil cu (84.5, b), numai dacă $n_1 = n_2 = 0$. Acum, din (84.2) obținem $n_3 = \pm 1$. Prin urmare,

primele soluții sînt următoarele

$$\left. \begin{aligned} n^{(1)} &= e_3 \\ n^{(2)} &= -e_3 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(1)}, n^{(2)} &\parallel \langle 0001 \rangle \\ \lambda_{(1)} &= \lambda_{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (84.6)$$

Să considerăm cea de-a doua posibilitate : $n_3 = 0$. Din (84.5, b) rezultă că ori $n_2 = 0$, ori $2fn_1 + \lambda = 0$. În primul caz $n_1 = \pm 1$, iar $\lambda = \pm f$. În al doilea caz, sînt posibile toate patru combinațiile : $n_1 = \pm 1/2$, $n_2 = \pm \sqrt{3}/2$. În acest caz, $\lambda = -2n_1f$. Așadar, se obțin următoarele soluții

$$\left. \begin{aligned} n^{(3)} &= e_1, \\ n^{(4)} &= -\frac{1}{2}e_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}e_2, \\ n^{(5)} &= -\frac{1}{2}e_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}e_2, \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(3)}, n^{(4)}, n^{(5)} &\parallel \langle 2\bar{1}10 \rangle \\ \lambda_{(3)} &= \lambda_{(4)} = \lambda_{(5)} = f; \end{aligned} \quad (84.7)$$

$$\left. \begin{aligned} n^{(6)} &= -e_1, \\ n^{(7)} &= \frac{1}{2}e_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}e_2, \\ n^{(8)} &= \frac{1}{2}e_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}e_2, \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(6)}, n^{(7)}, n^{(8)} &\parallel \langle \bar{2}110 \rangle \\ \lambda_{(6)} &= \lambda_{(7)} = \lambda_{(8)} = -f. \end{aligned}$$

Vectorii $n^{(3)}$, $n^{(4)}$ și $n^{(5)}$ sînt echivalenți simetric; nu este de mirare că tuturor le corespunde o aceeași valoare unică, $\lambda = f$. Cei trei vectori cărora le corespunde $\lambda = -f$ sînt, de asemenea, firește, echivalenți simetric. Este clar că soluțiile (84.7) corespund extremalelor funcției $M(n)$, care depinde de semnul coeficientului $f = f_{111}$. Soluția (84.6) nu corespunde însă unui extremum. Prin urmare, drept direcții extremale pentru efectul piezoelectric longitudinal în cristalele de cuarț (și în general pentru cristalele cu simetria efectului piezoelectric longitudinal $\bar{6}m2$) servesc axele de ordinul al doilea. Toate acestea se văd din proiecția stereografică a suprafeței septorului unitar, $S^0[\bar{6}m2]$ (v. fig. 47.4); trebuie numai să fim atenți la aranjarea axelor de coordonate.

Soluția problemei 1 b. Pentru cristalele cu simetria $43m$ a efectului piezoelectric longitudinal, ecuațiile (84.3)

capătă forma

$$2fn_2n_3 - \lambda n_1 = 0,$$

$$2fn_3n_1 - \lambda n_2 = 0, \quad (84.8)$$

$$2fn_1n_2 - \lambda n_3 = 0,$$

în care s-a notat $f_{123} = f$. Conform lui (84.4) $\lambda = 6fn_1n_2n_3$. Substituind valoarea lui λ în ecuațiile (84.8), obținem sistemul

$$n_2n_3(1 - 3n_1^2) = 0,$$

$$n_3n_1(1 - 3n_2^2) = 0, \quad (84.9)$$

$$n_1n_2(1 - 3n_3^2) = 0.$$

Ne putem ușor convinge că sistemul (84.9) are trei seturi de soluții simetric echivalente

$$\left. \begin{aligned} n^{(1,2)} &= \pm e_1, \\ n^{(3,4)} &= \pm e_2, \\ n^{(5,6)} &= \pm e_3 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(1)}, \dots, n^{(6)} &\parallel \langle 100 \rangle, \\ \lambda_{(1)} &= \dots = \lambda_{(6)} = 0; \end{aligned} \quad (84.10)$$

$$\left. \begin{aligned} n^{(7)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e_1 + e_2 + e_3), \\ n^{(8)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e_1 - e_2 - e_3), \\ n^{(9)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-e_1 + e_2 - e_3), \\ n^{(10)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-e_1 - e_2 + e_3), \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(7)}, \dots, n^{(10)} &\parallel \langle 111 \rangle, \\ \lambda_{(7)} &= \dots = \lambda_{(10)} = \frac{2f}{\sqrt{3}}; \end{aligned} \quad (84.11)$$

$$\left. \begin{aligned} n^{(11)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-e_1 + e_2 + e_3), \\ n^{(12)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e_1 - e_2 + e_3), \\ n^{(13)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e_1 + e_2 - e_3), \\ n^{(14)} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (-e_1 - e_2 - e_3), \end{aligned} \right\} \begin{aligned} n^{(11)}, \dots, n^{(14)} &\parallel \langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle, \\ \lambda_{(11)} = \dots = \lambda_{(14)} &= -\frac{2f}{\sqrt{3}}. \end{aligned}$$

(84.12)

Evident, nici în acest caz setul de soluții (84.10) nu corespunde nici unui extrem, pe când seturile (84.11) și (84.12) corespund valorilor extremale ale funcției $M(\mathbf{n})$: astfel, dacă coeficientul $f = f_{123}$ este pozitiv, atunci pentru un $\mathbf{n}^{(s)}$ oarecare din setul (84.11), funcția $M(\mathbf{n})$ atinge valoarea sa maximă, iar pentru un $\mathbf{n}^{(s)}$ din setul (84.12) valoarea minimă. Anizotropia efectului piezoelectric longitudinal, care are asemenea simetrie, este reprezentată de suprafața septorului $S^0[\bar{4}3m]$, a cărei proiecție stereografică este reprezentată în figura 47.3.

Soluția problemei 1 c. Această problemă este mai ușor de rezolvat dacă nu se apelează la metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminați. Îl vom exprima pe M ca funcție de unghiul $\theta = \arccos(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_3)$, folosindu-ne de formulele (58.10) și de tabelul 47.4

$$M(\theta) = F_V \cos \theta + \frac{1}{8} F_S (3 \cos \theta + 5 \cos 3\theta). \quad (84.13)$$

Aici F_V și F_S sînt coeficienții dezvoltării tensorului \mathbf{f} în raport cu tensorii unitari ireductibili, $V^0[\infty m]$ și $S^0[\infty m]$. Problema se reduce la determinarea valorii unghiului θ , pentru care funcția $M(\theta)$ este extremă. Pentru aceasta este necesar să se rezolve ecuația

$$\frac{dM}{d\theta} = 0,$$

care se aduce în forma

$$\sin \theta \left[-F_V + \frac{3}{16} F_S (4 - 5 \sin^2 \theta) \right] = 0. \quad (84.14)$$

Pentru orice valori ale raporturilor dintre F_v și F_s ea are soluțiile

$$\theta_{(1)} = 0, \quad \theta_{(2)} = \pi, \quad M(\theta_{(1,2)}) = \pm(F_v + F_s), \quad (84.15)$$

iar atunci cînd raportul F_v/F_s este suficient de mic în valoare absolută, și anume, dacă este valabilă inegalitatea,

$$\frac{3}{4} \geq F_v/F_s \geq -\frac{3}{16}, \quad (84.16)$$

precum și soluțiile

$$\theta_{(3)} = \arcsin \sqrt{\frac{4}{5} - \frac{16}{5}(F_v/F_s)}, \quad \theta_{(4)} = \pi - \theta_{(3)},$$

$$M(\theta_{(3,4)}) = \pm \left(\frac{11}{3} F_v - F_s \right) \sqrt{\frac{1}{5} + \frac{16}{5}(F_v/F_s)}. \quad (84.17)$$

Ambele cazuri — ale celor două extremuri și ale celor patru extremuri — se pot vedea în figura 58.1. Pentru delimitarea tipului vectorial de tipul septorial de anizotropie a efectului piezoelectric longitudinal cu simetria ∞m , este normal să se folosească tocmai numărul de extremuri; astfel, în cazul în care este satisfăcută inegalitatea (84.16) are loc o anizotropie septorială, iar în cazul în care aceasta nu este satisfăcută, tipul vectorial de anizotropie.

Acest exemplu arată că în ciuda faptului că direcțiile legate de elementele de simetrie sînt deseori niște extremuri, totuși valorile extreme pot fi atinse și după direcțiile care nu au nimic comun cu elementele de simetrie.

P r o b l e m a 2. Cum să se taie dintr-un cristal piezoelectric dat o lamă, astfel încît densitatea de sarcină care apare pe armăturile scurtcircuitate, sub acțiunea unei întinderi uniaxiale într-o anumită direcție, cuprinsă în planul plăcii, să fie extremă.

S o l u Ț i e. Așa cum s-a arătat în § 59, densitatea de sarcină este, în aceste condiții, proporțională cu expresia

$$M(n) = n \cdot d : qq = A \cdot n, \quad (84.18)$$

în care n este vectorul unitar al normalei la lamă, d este tensorul coeficienților piezoelectricei, q — vectorul unitar al direcției de întindere, iar vectorul $A = d : qq$. Trebuie găsit vectorul n , unitar

și perpendicular pe q

$$\Phi_1(n) = n \cdot n - 1 = 0, \quad \Phi_2(n) = q \cdot n = 0 \quad (84.19)$$

și astfel încât funcția $M(n)$ să fie o extremală. Să compunem, în acest scop, funcția

$$F = M - \frac{1}{2} \lambda \Phi_1 - \mu \Phi_2,$$

în care λ și μ sînt multiplicatori Lagrange nedeterminați. Vectorii n , pe care îi căutăm, satisfac ecuația (84.19) și ecuația

$$\frac{\partial F}{\partial n} = A - \lambda n - \mu q = 0. \quad (84.20)$$

Înmulțim ecuația (84.20) scalar cu q și, avînd în vedere că $q \cdot n = 0$ găsim $\lambda = A \cdot q$. Înmulțind scalar (84.20) cu n , obținem $\lambda = A \cdot n$. În fine, înmulțind scalar (84.20) cu A , îl vom calcula pe

$$A \cdot n = \sqrt{A^2 - (A \cdot q)^2}.$$

Înlocuind toate valorile găsite în (84.20), obținem soluția problemei puse

$$n = \frac{(I - qq) \cdot A}{\sqrt{A^2 - (A \cdot q)^2}}, \quad M = \sqrt{A^2 - (A \cdot q)^2}. \quad (84.21)$$

P r o b l e m a 3. Dintr-un cristal piezoelectric este tăiată o lamă a cărei orientare este dată de vectorul unitar al normalei n la planul ei. Care trebuie să fie orientarea întinderii uniaxiale, cuprinsă în planul lamei, pentru ca să fie extremă a) densitatea de sarcină care apare pe armăturile ei scurtcircuitate; b) diferența de potențial de pe armăturile ei care nu sînt scurtcircuitate?

S o l u ț i e. Atît densitatea de sarcină care apare sub acțiunea unei întinderi uniaxiale pe armăturile scurtcircuitate, cît și diferența de potențial care apare sub acțiunea acestei întinderi pe armăturile nescurtcircuitate sînt proporționale cu funcția

$$M(q) = B_{ki} q_k q_i = B : qq, \quad (84.22)$$

unde q este vectorul unitar al direcției de întindere. Pentru densitatea de sarcină tensorul $B = n \cdot d$, iar pentru diferența de potențial $B = n \cdot d / (n \cdot n \cdot n)$; aici d este tensorul coeficienților pie-

zoelectrice, iar κ , tensorul permitivității dielectrice. Problema se reduce la găsirea vectorilor \mathbf{q} care satisfac condițiile

$$\Phi_1(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{q} - 1 = 0, \quad \Phi_2(\mathbf{q}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (84.23)$$

pentru care funcția $M(\mathbf{q})$ atinge valoarea extremă. Pentru aceasta se construiește funcția ajutătoare

$$F = \frac{1}{2} M - \frac{1}{2} \lambda \Phi_1 + \mu \Phi_2$$

cu multiplicatorii λ și μ nedeterminați și se rezolvă sistemul format din ecuațiile (84.23) și din

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{q} - \lambda \mathbf{q} + \mu \mathbf{n}, \quad \frac{\partial F}{\partial q_k} = B_{k1} q_1 - \lambda q_k + \mu n_k. \quad (84.24)$$

O asemenea problemă a fost analizată amănunțit în §37 — v. relațiile (37.7) și în continuare. Acolo s-a arătat că tensorii și vectorii care figurează în problemă este convenabil să fie raportați la un sistem de coordonate a căruia axă X_3 este orientată după vectorul \mathbf{n} . Efectuând aceasta, găsim valorile extreme ale funcției $M = \mathbf{B} : \mathbf{q}\mathbf{q}$

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{1}{2} [(B_{11} + B_{22}) \pm \sqrt{(B_{11} - B_{22})^2 + (2B_{12})^2}] \quad (84.25)$$

și sistemul de ecuații pentru determinarea componentelor $q_1^{(s)}$ și $q_2^{(s)}$ ($s = 1, 2$)

$$(B_{11} - \lambda_{(s)} q_1^{(s)} + B_{12} q_2^{(s)} = 0, \quad (84.26)$$

$$B_{12} q_1^{(s)} + (B_{22} - \lambda_{(s)}) q_2^{(s)} = 0,$$

componenta $q_3^{(s)}$ fiind egală cu zero.

În general, problemele de extremum ale fizicii cristalelor, după cum se vede chiar și din puținele exemple date aici, sînt destul de variate și chiar destul de complicate. Ele se aseamănă, se pare, nu numai prin caracterul comun al problemei, ci și prin metoda generală de rezolvare — metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminați. Problema 1c, care a fost rezolvată prin alt procedeu, nu contrazice, ci mai degrabă confirmă această con-

cluzie : pentru ca tocmăi de aceea s-a și reușit rezolvarea fără a apela la metoda multiplicatorilor nedeterminați, deoarece simetria proprietăților piezoelectrice ale mediului este definită nu printr-un grup cristalografic, ci prin grupul limită.

§ 85. PROBLEMA COMPARĂRII PROPRIETĂȚILOR TENSORIALE ALE CRISTALELOR

Fiind vorba despre proprietățile scalare ale unui cristal — cum ar fi densitatea și căldura specifică — nu constituie nici o dificultate să se stabilească dacă aceste proprietăți coincid sau sînt apropiate ca mărime pentru două substanțe diferite. Dacă trecem la examinarea proprietăților vectoriale — să zicem a coeficienților piroelectrici — deja se poate vorbi despre problema comparării acestor proprietăți, cu toate că și în cazul dat ea se rezolvă foarte ușor : evident, proprietățile piroelectrice ale două cristale sînt asemănătoare dacă coincide suma pătratelor coeficienților piroelectrici

$$p_i^{(1)} p_i^{(1)} = p_j^{(2)} p_j^{(2)}. \quad (85.1)$$

Aceste proprietăți sînt apropiate dacă expresiile (85.1), nefiind egale, se deosebesc suficient de puțin una de alta. Astfel, turmalina, cristal din clasa $3m$, al cărei vector al coeficienților piroelectrici, $p^{(1)} = 1,2e_2$ (în unități CGSE), după proprietățile sale piroelectrice s-ar apropia foarte mult de cristalul ipotetic din clasa 1, cu vectorul coeficienților piroelectrici $p^{(2)} = 0,4e_1 + 0,8e_2 + 0,8e_3$ (în aceleași unități).

Problema comparării proprietăților este încă și mai simplă, dacă proprietatea care ne interesează este descrisă de un tensor simetric de rangul doi : pentru coincidența unor astfel de proprietăți este necesar și suficient să coincidă valorile proprii ale tensorilor de material care sînt comparați.

Să studiem problema comparării unei proprietăți tensoriale arbitrare, în cazul a două cristale care aparțin aceleiași clase. Mai exact, vom presupune că forma tensorului de material corespunzător este aceeași pentru toate cristalele.

Aici trebuie să deosebim două cazuri. Dacă tensorul dat are tot atîția invarianti independenți cîte componente independente sînt, condiția necesară și suficientă de coincidență a proprietăților este egalitatea tuturor componentelor tensorului de material al unuia dintre cristale cu componentele de aceeași indici ale tensorului de material al celuilalt cristal

$$A_{i\dots k}^{(1)} = A_{i\dots k}^{(2)}.$$

Dacă însă pentru tensorul de material dat, numărul de componente independente și numărul de invarianți independenți nu coincid, problema se complică substanțial. Așa cum s-a explicat în § 47, un tensor, ca obiect geometric, este definit prin invarianții săi. Dacă numărul de componente independente este mai mare decât numărul de invarianți, aceasta înseamnă că simetria cristalinului admite o rotație a tensorului de material de tipul dat, ca corp solid, față de structura cristalină (și față de sistemul de coordonate cristalofizic, legat de structura cristalină). În acest caz, se poate întâmpla ca coincidența componentelor a doi tensori de material față de sistemul de coordonate cristalofizic să nu fie determinat de o diferență între acești tensori, ca obiecte geometrice, ci, pur și simplu, de faptul că ei sînt orientați diferit față de sistemul de coordonate cristalofizic. Rezultă deci că înainte de a-i compara, astfel de tensori trebuie să fie orientați în același fel; dacă tensorii de material sînt orientați la fel, atunci, în cazul coincidenței unei anumite proprietăți, toate componentele unui tensor vor fi tot egale cu componentele cu aceiași indici ale celuilalt tensor. Problema comparării proprietăților tensoriale s-a redus la realizarea unei aceleiași orientări a celor doi tensori de material. În fiecare caz concret nu este greu să ne dăm seama cum trebuie procedat. Vom examina două exemple.

Se compară proprietățile piezoelectrice a două cristale din clasa m . Tensorul coeficienților piezoelectrice, d , pentru această clasă, are 10 componente independente, pe cînd invarianți independenți are numai 9; componenta „suplimentară” caracterizează rotația tensorului în planul de simetrie $m \perp X_2$. Să analizăm vectorul $d = d : I$, cu componentele $d_i = d_{ikk}$, care caracterizează efectul piezoelectric sub acțiunea unei comprimări hidrostatice. În această clasă, el are forma (v. tabelul 58.2)

$$d = (d_{11} + d_{12} + d_{13}) e_1 + (d_{31} + d_{32} + d_{33}) e_3 = d_1 e_1 + d_3 e_3. \quad (85.2)$$

Vom denumi sistem propriu de coordonate, $X'_1 X'_2 X'_3$, al tensorului d , acel sistem care are axa X'_1 orientată după vectorul d ; unghiul de rotație a lui față de sistemul cristalofizic $X_1 X_2 X_3$ se determină din ecuația

$$d_3' = d_1 \sin \varphi + d_3 \cos \varphi = 0 \quad (85.3)$$

cu condiția suplimentară

$$d_1' = d_1 \cos \varphi - d_3 \sin \varphi > 0. \quad (85.4)$$

Raportînd fiecare tensor la sistemul lui propriu, se pot compara componentele tensorilor.

Este cazul să subliniem că sistemul propriu de coordonate poate fi introdus și prin alte procedee (de exemplu, se poate considera drept sistem propriu sistemul $X_1''X_2X_3''$, determinat prin condițiile $d_{322}'' = 0$, $d_{122}'' > 0$); orice sistem propriu definit în mod convenabil este util pentru compararea tensorilor de material.

Urmîndu-l pe Novojilov (1958, cap. V, §§ 19, 20), vom mai studia și problema comparării proprietăților elastice ale cristalelor sistemului triclinic. Tensorul coeficienților deformabilității elastice, s , are 21 de componente independente și numai 18 invarianți independenți. Drept sistem de coordonate propriu al său poate fi luat, de pildă, sistemul construit pe vectorii proprii ai componentelor tensorului de rangul doi, $S = s : I$ (componentele lui sînt $S_{ij} = s_{ijkl}$). Pentru compararea componentelor tensorilor deformabilității elastice ai diferitelor cristale, trebuie mai întîi raportat fiecare tensor la sistemul lui propriu de coordonate. În acest caz, sistemul propriu se poate lua, de asemenea, într-un alt mod, de exemplu, construindu-l pe vectorii proprii ai tensorului simetric de rangul doi, Z , de componente $Z_{ij} = z_{ikjk}$ (v. tabelele 53.1 și 54.1).

Să trecem la problema comparării proprietăților tensoriale ale cristalelor din diverse clase, cînd forma tensorilor comparați este diferită; ne vom mărgini la un caz particular important pentru fizica cristalelor, cazul în care una dintre clase este subgrup al celeilalte clase.

Să apelăm, de la bun început, la exemple. Să zicem că trebuie să comparăm proprietățile elastice ale modifațiilor cubică și tetragonală ale unui cristal de titanat de bariu. Aceste modifații se deosebesc una de alta numai prin mici deplasări ale atomilor (v. § 64) și, comparînd proprietățile lor elastice, este firesc să impunem condiția ca sistemele de coordonate din ambele modifații să fie orientate la fel față de structură. În cazul de față, celula elementară a modifației tetragonale se deosebește de o celulă a modifației cubice numai printr-o mică deformare în direcția axei tetragonale. Din această cauză, sistemele de coordonate cristalofizice, standard, au aceeași orientare față de structură, astfel încît se pot compara direct valorile tabelate ale componentelor tensorilor deformabilității elastice ale ambelor modifații de titanat de bariu.

Cristalul de trioxid de wolfram, WO_3 , prezintă, de asemenea, cele două modifații cubică și tetragonală, una dintre ele obținîndu-se din cealaltă tot numai printr-o deplasare mică a atomilor, însă în acest caz celula elementară a modifației tetragonale se deosebește esențial de celula modifației cubice: una dintre

muchiile ei concide cu o muchie a celulei cubice, pe cînd celelalte două — cu diagonalele fețelor celulei cubice. Din această cauză, sistemele cristalofizice ale ambelor modifcații sînt orientate diferit față de structură; pentru a obține ca cele două sisteme să fie orientate la fel față de structură, trebuie ca unul dintre sistemele de coordonate cristalofizice, de pildă, cel tetragonal, să fie rotit cu 45° în jurul axei tetragonale. Cu toate că în sistemul de coordonate rotit, tensorul coeficienților deformabilității elastice va avea aceeași formă ca și sistemul de coordonate cristalofizic inițial, componentele lui se modifică; după cum se poate deduce ușor, componentele tensorului „rotit” se exprimă prin componentele tensorului inițial în felul următor

$$\begin{bmatrix} s_{11} - a/2 & s_{12} + a/2 & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & s_{11} - a/2 & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} & 0 & 0 \\ & & & & s_{44} & 0 \\ & & & & & s_{66} + 2a \end{bmatrix}, \quad (85.5)$$

unde $a = s_{11} - s_{12} - s_{66}/2$. Toemai combinațiile liniare din acest tablou, nicidecum coeficienții cristalofizici ai deformabilității elastice ai modifcației tetragonale a trioxidului de wolfram, trebuie comparați cu coeficienții de aceeași indici ai tensorului deformabilității elastice ai modifcației sale cubice.

O situație analoagă apare în cazul comparării proprietăților piezoelectrice și elastice ale celor două modifcații cristaline de sulfură de zinc, ZnS — sfaleritul (clasa $\bar{4}3m$) și wurtzitul (clasa $6mm$). Pentru a putea compara direct coeficienții piezoelectrice și coeficienții deformabilității elastice ai ambelor modifcații, vom reprezenta tensorii de material ai modifcației cubice, într-un sistem de coordonate în care axa X_3 este orientată după axa de ordinul trei, iar X_1 după normala la unul dintre planurile de simetrie care trec prin ea *. Tensorul deformabilității elastice capătă,

* Prin urmare, noi comparăm o clasă $\bar{4}3m$ nu cu clasa $6mm$, la care se referă wurtzitul, ci cu clasa $3m$, deoarece $3m$, spre deosebire de $6mm$, este într-adevăr un subgrup al grupului $\bar{4}3m$. Mai departe, în general, s-ar putea ca și tensorii modifcației hexagonale să fie scriși în sistemul cristalofizic al clasei $3m$, însă putem să nu facem aceasta, deoarece tensorii respectivi satisfac condițiile teoremei lui Hermann.

în acest caz, forma

$$\begin{bmatrix} s_{11} - a/2 & s_{12} + a/6 & s_{13} + a/3 & a\sqrt{2/3} & 0 & 0 \\ & s_{11} - a/2 & s_{13} + a/3 & -a\sqrt{2/3} & 0 & 0 \\ & & s_{11} - 2a/3 & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} + 4a/3 & 0 & 0 \\ & & & & s_{44} + 4a/3 & 2a\sqrt{2/3} \\ & & & & & s_{44} + 2a/3 \end{bmatrix} \quad (85.6)$$

unde $a = s_{11} - s_{12} - s_{44}/2$, iar tensorul coeficienților piezoelec-
trici forma

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -d/\sqrt{3} & 2d/\sqrt{6} \\ d/\sqrt{6} & -d/\sqrt{6} & 0 & -d/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ -d/2\sqrt{3} & -d/2\sqrt{3} & d/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (85.7)$$

unde $d = d_{14}$. Numai scriind tensorul coeficienților deformabili-
tății elastice a sfaleritului în forma (85.6), iar tensorul coeficien-
ților lui piezoelectrice în forma (85.7) are sens să se compare acești
tensori cu tensorii de material corespunzători ai wurtzitului.

Ultimul exemplu : compararea proprietăților dielectrice, piezo-
electrice și elastice ale celor două modificări cristaline pentru
dihidrofosfatul de potasiu — tetragonal (clasa $\bar{4}2m$) și rombic
(clasa $mm2$). Din regula de alegere a sistemelor de coordonate
cristalofizice (v. anexa A), rezultă clar că pentru a se putea com-
para proprietățile tensoriale ale acestor două modificări, tensorii
uneia dintre ele trebuie raportați la un sistem de coordonate rotit
față de sistemul cristalofizic cu 45° în jurul axei X_3 . Tranziția
de fază care leagă cele două modificări între ele a fost studiată
în § 65 (v., de asemenea, tabelele 64.1 și 65.1); pentru această
problemă este mai convenabil să raportăm tensorii de material
ai modificării tetragonale la sistemul de coordonate cristalofizic,
iar tensorii de material ai modificării rombigice la sistemul rotit.

Aceștia din urmă vor căpăta acum forma

$$[\kappa_{i'j'}] = \begin{bmatrix} \frac{\kappa_{11} + \kappa_{22}}{2} & \frac{\mp \kappa_{11} \pm \kappa_{22}}{2} & 0 \\ & \frac{\kappa_{11} + \kappa_{22}}{2} & 0 \\ & & \kappa_{33} \end{bmatrix}, \quad (85.8)$$

$$[d_{i'\lambda'}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{\pm d_{24} \mp d_{15}}{2} & \frac{d_{24} + d_{15}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{d_{24} + d_{15}}{2} & \frac{\pm d_{24} \pm d_{15}}{2} & 0 \\ \frac{d_{31} + d_{32}}{2} & \frac{d_{31} + d_{32}}{2} & d_{33} & 0 & 0 & \pm d_{32} \mp d_{31} \end{bmatrix}, \quad (85.9)$$

$$[s_{\lambda'\mu'}] = \begin{bmatrix} \frac{s_{11} + s_{12} - a}{2} & \frac{2s_{12} + a}{2} & \frac{s_{13} + s_{23}}{2} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{11} \pm s_{32}}{2} \\ & \frac{s_{11} + s_{12} - a}{2} & \frac{s_{13} + s_{23}}{2} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{11} \pm s_{22}}{2} \\ & & s_{33} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{13} \pm s_{23}}{2} \\ & & & \frac{s_{44} + s_{55}}{2} & \frac{\pm s_{44} \mp s_{55}}{2} & 0 \\ & & & & s_{44} + s_{55} & 0 \\ & & & & & s_{66} + 2a \end{bmatrix}, \quad (85.10)$$

unde $a = 1/2(s_{11} + s_{22} - 2s_{12} - s_{66})$.

Combinațiile componentelor tabelate (cristalofizice) ale tenzorilor de material ai modificaliilor rombice a dihidrofosfatului de potasiu se pot compara cu valorile lor tabelate pentru modificaliia tetragonală a acestei substanțe. Tocmai aceasta s-a realizat

în tabelul 65.1. Nedeterminarea semnului în cazul unor componente apare pentru că planurile de simetrie care sînt echivalente în clasa $\bar{4}2m$ devin neechivalente în clasa $mm2$ și deocamdată nu știm la care dintre planurile de simetrie este perpendiculară axa X_1 a modifației rombice și la care dintre ele axa X_2 ; pentru a stabili aceasta, trebuie măsurați, sau, cel puțin, comparați între ei parametrii celulei elementare ai modifației rombice.

În acest paragraf problema comparării proprietăților tensoriale ale cristalelor a fost expusă pe exemplul proprietăților dielectrice, piezoelectrice și elastice. Celelalte proprietăți tensoriale ale cristalelor pot fi comparate utilizînd aceleași metode.

§ 86. PROBLEMA ALEGERII SISTEMELOR DE COORDONATE CRISTALOGRAFICE ȘI CRISTALOFIZICE STANDARD

Să ne imaginăm o situație obișnuită în zilele noastre : în două laboratoare diferite este sintetizat, independent, un același cristal și se studiază proprietățile lui. Pentru a-l descrie la fel, cercetătorii ambelor laboratoare trebuie să aleagă în același mod sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice, pentru aceasta fiind însă necesare reguli de alegere a sistemului de coordonate general acceptate, care să fie exact aceleași.

Aici sînt expuse indicațiile existente pentru alegerea sistemelor și se analizează posibilitățile precizării lor. Este vorba despre faptul că pentru alegerea, în fiecare singonie, a axelor de coordonate cristalografice, X , Y , Z , există reguli unanim acceptate (v. § 4). Au căpătat, de asemenea, largă răspîndire regulile care permit să se facă legătura dintre axele cristalofizice, X_1 , X_2 , X_3 , și axele cristalografice, X , Y , Z . Aceste reguli sînt următoarele : cînd un sistem cristalografic de coordonate este rectangular, axele X_1 , X_2 , X_3 coincid, respectiv, cu axele X , Y , Z ; în cristalele singoniei hexagonale axele X_3 și X_1 coincid, respectiv, cu axele Z și X ; în cristalele singoniei monoclinice axele X_2 și X_3 coincid, respectiv, cu axele Y și Z ; în fine, în cristalele singoniei triclinice axa X_3 coincide cu axa Z , iar axa X_1 se află în planul (010), adică în planul XZ . Aceste reguli sînt reunite în tabelul A.2, în concordanță cu ele fiind întocmite și tabelele A.1 și B.1. Formularea acestor reguli este dată în *IRE Standards on Piezoelectric Crystals* (1949); v. și Mason (1952). Mai trebuie însă alese sensurile pozitive pe axe și decis care dintre axele simetric echivalente se numesc, să zicem, X și care Y . Datele structurale sînt insuficiente pentru acest lucru; sîntem nevoiți să utilizăm rezultatele unor determinări cristalofizice. Recomandările corespunzătoare sînt conținute

în *IRE Standards* (1949). Din nefericire, aceste recomandări se referă la cristalele piezoelectrice. În plus, pentru ca aceste cristale să poată fi utilizate în cazul unui cristal enantiomorf dat, trebuie știut dacă cristalul este dextrogir sau levogir; dar care anume cristale trebuie denumite dextrogire și care levogire nu este indicat în aceste standarde (cu excepția cristalului de cuarț, căruia îi este consacrat un punct separat).

Aici sînt formulate reguli de alegere a sistemelor de coordonate valabile pentru toate clasele cristalografice; în limita posibilităților ele concordă cu recomandările *IRE*. În afară de aceasta, aici sînt propuse regulile generale pentru a decide care dintre două modificării enantiomorfe este cea dextrogiră. Vom examina aceste reguli, luînd, mai întîi ca exemplu singonia tetragonală.

Dacă într-un cristal oarecare cu singonie tetragonală se ia, conform regulilor generale (v. § 4), un sistem de coordonate A (fig. 86.1), atunci și sistemele B, C, \dots, H , legate de sistemul A prin operațiile de simetrie ale clasei 222, satisfac, de asemenea, regulile de alegere a axelor de coordonate cristalografice; aceste reguli permit distingerea între un sistem și altul. În clasele $4/mmm$ și 422 toate aceste sisteme sînt simetric echivalente, astfel încît deosebirea lor nici nu este posibilă și nici necesară. În celelalte opt clase, aceste sisteme sînt însă grupate în seturi de sisteme simetric echivalente, după cum se vede din următorul tabel:

Clasele	Transformarea de prima speță	Seturile de sisteme echivalente
$4mm, 4/m, 4$	$1, 2_z, 4_z, 4_z^3$	$\{A, B, C, D\}; \{E, F, G, H\}$
$\bar{4}2m$	$1, 2_z, 2_x, 2_y$	$\{A, B, E, F\}; \{C, D, G, H\}$
$\bar{4}$	$1, 2_z$	$\{A, B\}; \{C, D\}; \{E, F\}; \{G, H\}$

Notățiile transformărilor și ale sistemelor de coordonate sînt aici aceleași cu cele din figura 86.1; sistemele de coordonate care fac parte dintr-un set sînt cuprinse în acolade. Sistemele care fac parte din seturi diferite sînt simetric neechivalente și pot (și trebuie) să fie deosebite unul de altul.

În clasele $4mm$ și $\bar{4}2m$, pentru alegerea unuia dintre cele două seturi de sisteme de coordonate, posibile în cristalele acestor clase, se utilizează recomandările *IRE*: în clasa $4mm$ vom alege acel set față de care este pozitiv coeficientul piezoelectric d_{33} , în clasa $\bar{4}2m$ pe acela față de care este pozitiv coeficientul d_{36} .

Clasa $4/m$ are centru de simetrie, nu posedă proprietăți piezoelectrice și de aceea în *IRE Standards* (1949) nu este luată în considerație. În această clasă sistemele de coordonate permise sînt

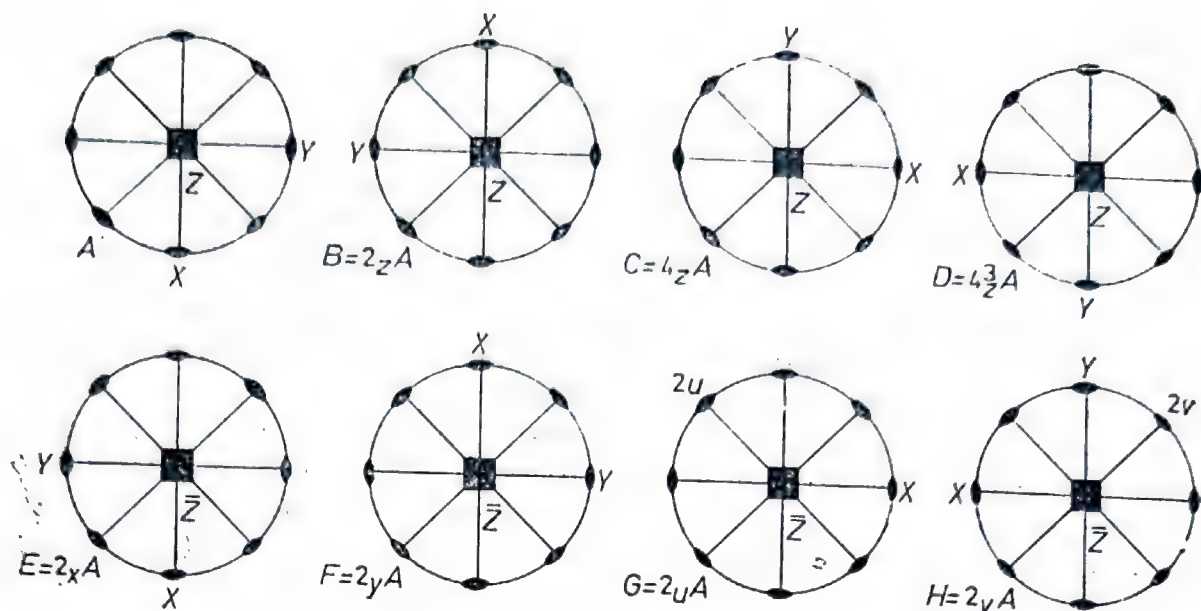


Fig. 86.1. Schema alegerii denumirilor și a sensurilor pozitive ale direcțiilor axelor de coordonate în cristalele singoniei tetragonale.

însă grupate în cele două seturi (v. tabelul); vom conveni să îl alegem pe acela dintre ele, față de care coeficientul deformabilității elastice, s_{16} , este pozitiv (se poate verifica ușor că operațiile de simetrie care transformă un set în altul modifică semnul acestui coeficient; astfel, $2_x s_{16} = -s_{16}$).

Aceeași regulă poate fi aplicată și pentru alegerea unuia dintre cele două seturi posibile din clasa 4 cât și a unei perechi de seturi dintre cele două perechi analoage, posibile în clasa $\bar{4}$. Pentru a alege un set dintre cele două, care formează această pereche, vom cere suplimentar ca coeficientul d_{36} să fie pozitiv. Menționăm că grupul $\bar{4}$ este unicul subgrup comun grupurilor $4/m$ și $\bar{4}2m$, fiind deci normal ca pentru clasa $\bar{4}$ să unificăm regulile aplicate atât clasei $4/m$ cât și clasei $\bar{4}2m$; aceasta s-a și făcut aici.

A rămas să mai indicăm regulile care permit să denumim una dintre modificările enantiomorfe ale claselor $\bar{4}22$ și 4, modificare dextrogiră. Vom conveni să denumim modificare dextrogiră pe aceea dintre modificările clasei $\bar{4}22$ pentru care este pozitiv coeficientul piezoelectric, d_{14} , cât și pe aceea dintre modificările clasei 4 pentru care este pozitiv coeficientul d_{33} . Coeficienții sînt definiți față de setul sistemelor de coordonate simetric echivalente drepte, pentru clasa dată; în acest caz este important ca alegerea setului din clasa 4 să se facă în raport cu o proprietate care are centru de simetrie (elasticitatea), care se manifestă absolut identic în ambele modificări enantiomorfe. În general, pentru definirea modificării dextrogire s-ar fi putut utiliza oricare dintre coeficienții piezoelectrice și, mai mult decît atît, oricare componentă

a unui tensor de material de tip impar (v. § 44), care este diferită de zero, în cristalele claselor corespunzătoare.

După modelul exemplului examinat, s-ar putea analiza modelele alegerii univoce a sistemelor de coordonate cristalografice și cristalofizice pentru fiecare singonie în parte, însă este mai nimerit ca, bazându-ne pe procedeele utilizate în acest exemplu să se formuleze reguli generale pentru toate clasele cristalografice.

Convenim să luăm sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice dextrogire, iar unghiurile dintre direcțiile pozitive ale axelor cristalografice și cristalofizice corespunzătoare (X și X_1 , Y și X_2 , Z și X_3) mai mic decât 90° . Din această cauză, alegerea sensului pozitiv pe o axă cristalografică (să zicem X) determină sensul pozitiv pe axa cristalofizică corespunzătoare (X_3) și invers. Pentru cristalele din singonia monoclinică se mai folosește convenția ca unghiul β dintre direcțiile pozitive ale axelor X și Z să fie obtuz, pentru singonia triclinică fiind necesar ca pe lângă β să fie obtuz și unghiul α , dintre direcțiile pozitive ale axelor Y și Z . Aceste inegalități, împreună cu condiția ca sistemul de coordonate să fie dextrogir, definesc sensurile pozitive pe axele cristalografice ale singoniilor triclinică și monoclinică.

Regulile de alegere a axelor cristalografice și a sensurilor pozitive de pe acestea definesc nu un singur sistem de axe de coordonate, ci $n/2$ sisteme, rotite unul față de altul (n este ordinul grupului de simetrie a clasei holodrice a singoniei date), care sînt legate între ele prin transformări de speța întii, ce fac parte din grupul de simetrie al clasei holodrice, sau, ceea ce este același lucru, toate transformările de simetrie ale clasei enantiomorfe hemiedrice (v. tabelul 86.1). Toate aceste sisteme sînt simetric echivalente în cristalele claselor holodrică și hemiedrică enantiomorfă, astfel încît nici nu se pune problema alegerii sensurilor pozitive pe axe, sau denumirea axelor pentru cristalele acestor clase. Față de operațiile de simetrie ale celorlalte clase, cele $n/2$ sisteme de coordonate vor reprezenta două sau patru seturi de sisteme simetric echivalente (cu cîte $n/4$ sau $n/8$ sisteme în fiecare). Numărul acestor seturi pentru fiecare clasă este dat în tabelul 86.1. Sistemele unui set sînt legate de sistemele celorlalte seturi prin transformările de simetrie ale clasei hemiedrice enantiomorfe, de aceeași singonie, care nu fac parte din grupul clasei date.

Alegerea sensurilor pozitive pe axele de coordonate sau denumirea axelor se reduce la alegerea unuia dintre cele două sau patru seturi posibile. În acest caz trebuie să ne ghidăm după criteriile cristalofizice (întrucît cele cristalografice au fost deja epuizate) și să utilizăm seturile formate din sistemele cristalofizice, obținute din cele cristalografice, conform regulilor convenite. Sistemele de

Tabelul 86.1

Metodele de alegere a sistemelor de coordonate și a modificărilor dextrogire în cele 32 de clase cristalografice

Singoii și sisteme		Clasele cristalografice							
		holoedrice		hemiedrice		tetartoedrice		octoedrice	
		enantiomorfe	hemimorfe	paramorfe	enantiomorfe	hemimorfe	paramorfe	enantiomorfe	enantiomorfe
Triclinică	$\{\bar{1}\}$	1							
Monoclinică	$\{2/m\}$	2	m						
Rombică	$\{mmm\}$	222	$mm2$						
Tetragonală	$\{4/mmm\}$	422	$4mm, \bar{4}2m$	$\{4/m\}$	4	$\bar{4}$			
Hexagonală	$\{6/mmm\}$	622	$6mm, \bar{6}m2$	$\{6/m\}$	6	$\bar{6}$			
trigonală				$\{\bar{3}m\}$	32	$3m$	$\{\bar{3}\}$		
Cubică	$\{m\bar{3}m\}$	432	$\bar{4}3m$	$\{m\bar{3}\}$	23				
Numărul de seturi	1	1	2	2	2	4	4	4	4
Alegerea sistemului de coordonate	—	—	1 impară	1 pară	1 pară	1 pară 1 impară	2 pare	2 pare	
Alegerea modifiicăiei dextrogire	—	1 impară	—	—	1 impară	—	—	—	1 impară

Observații. Între acolade sînt cuprinse clasele care fac parte dintr-un același subsistem: în stînga — subsistemul superior al sistemului dat, în dreapta — cel inferior. „Numărul de seturi” arată cîte seturi diferite ale sistemelor de coordonate și nătric echivalente, care satisfac toate condițiile cristalografice impuse, au cristalele din clasele considerate. În rîndurile „Alegerea sistemului de coordonate” și „Alegerea modifiicăiei dextrogire” sînt indicate semnele numărului de componente ale tensorilor de material și de care tip anume — par sau impar — care trebuie determinate pentru alegerea sistemului de coordonate și a modifiicăiei dextrogire.

coordonate cristalofizice, care intră în unul dintre seturi, sînt simetric echivalente, pe cînd cele care fac parte din seturi diferite sînt neechivalente. Din această cauză, orice tensor de material al unui cristal, în toate sistemele ce fac parte din același set, are aceleași componente, iar în sistemele care aparțin unor seturi diferite unii dintre tensorii de material pot avea componente diferite, chiar dacă acest fapt nu este obligatoriu. În principiu, totdeauna se poate găsi un tensor de material la care cel puțin una dintre componente să-și schimbe semnul prin trecerea de la un set la altul; în clasa în care aceste seturi se contopesc în unul singur, acea componentă se va anula. Alegerea unuia dintre cele două seturi va fi complet determinată dacă vom conveni să folosim pentru fiecare cristal dat acel set față de care această componentă este pozitivă.

Cristalele claselor paramorfe, adică ale acelor clase cu centru de simetrie care nu sînt holodrice, au numai proprietăți cu centru de simetrie; de aceea, pentru alegerea setului, trebuie folosiți tensori de tip par, care au, în clasa paramorfă dată, un număr de componente mai mare decît în clasa holodrică corespunzătoare (dacă clasa considerată este tetartoedrică, au mai multe decît în clasa hemiedrică paramorfă). În sistemele trigonal și tetragonal această condiție este satisfăcută deja de tensorii elastici, însă pentru sistemele hexagonal și cubic trebuie recurs la tensorii piezooptici.

Regulile de alegere, admise pentru clasa paramorfă, este firesc să fie extinse asupra întregului subsistem (v. § 44) din care acesta face parte. În acest caz se dovedește că alegerea sistemului de coordonate nu numai pentru clasele paramorfe, ci și pentru cele enantiomorfe (tetartoedrice și octoedrice) este determinată de tensorii de tip par (utilizarea tensorilor care nu au centru de simetrie deosebește substanțial aceste recomandări de *IRE Standards* — 1949 — în care se utilizează numai tensori de tip impar, și anume, tensori piezoelectrics).

În clasele hemimorfice, pentru alegerea unui set este necesară o componentă a unui tensor de material de tip impar; vom conveni să utilizăm în acest scop primul coeficient piezoelectric diferit de zero din șirul

$$d_{33}, d_{11}, d_{22}, d_{36}, d_{14} \quad (86.1)$$

(cu coeficientul d_{31} în locul lui d_{14} acest șir se utilizează și în *IRE Standards* (1949)). În acest caz, pentru alegerea unui set din clasa hemimorfă tetartoedrică trebuie utilizat acel coeficient, care, în clasa enantiomorfă tetartoedrică a aceleiași singonii, este egal cu zero.

Conform regulilor expuse, în cristalele dextrogire sau levogire ale oricărei clase enantiomorfe sistemul de coordonate se alege în același fel, deoarece la alegere se folosesc numai tensori cu centru de simetrie. Tensorii fără centru de simetrie pot fi utilizați după aceasta pentru determinarea modificății dextrogire, deoarece componentele acestor tensori, în cazul modificățiilor dextrogire și levogire ale aceleiași substanțe, sînt egale în valoare absolută, fiind de semne contrare, față de sistemul de coordonate introdus. Convenim să numim dextrogire acele cristale la care primul coeficient piezoelectric diferit de zero din șirul (86.1) este pozitiv. În clasa 432, în care toți coeficienții piezoelectrici sînt nuli, vom numi modificare dextrogiră acea modificare în care este pozitiv coeficientul de rotație (v. §81).

În tabelul 86.1 este arătat care sînt clasele care se numesc holodrice, care hemiedrice etc., cum sînt ele distribuite în subsisteme, cîte seturi și componente au și ce fel de tensori — de tip par sau de tip impar — sînt necesari pentru alegerea sistemului de coordonate și pentru determinarea modificății dextrogire. Regulile de alegere propriu-zise ale sistemelor de coordonate cristalografice și cristalofizice standard, pentru cele 32 de clase, și regulile de alegere a modificății dextrogire în cele 11 clase enantiomorfe sînt cuprinse însă în tabelul A.2.

La sfîrșitul tabelului A.2 există rubrica „Modificări posibile”, în care se arată cum se vor modifica regulile de alegere a axelor de coordonate și a modificățiilor enantiomorfe, dacă se ia o altă aranjare pentru cristalele tuturor claselor singoniei monoclinice $Z \parallel 2$, sau $Z \perp m$ și clasa $\bar{6}m2$, care, în această aranjare ($Z \parallel \bar{6}$, $X \parallel 2$) este firesc să fie notată cu $\bar{6}2m$. Tocmai astfel sînt alese sistemele de coordonate cristalofizice în tratatele clasice (Voigt, 1928; Șubnikov, Flint și Boki, 1940), în unele cazuri această alegere fiind de preferat.

Aici sînt analizate metodele generale, nu procedeele concrete de alegere a sistemelor standard de coordonate. Se pot dovedi mai convenabili pentru aplicațiile practice nu acei coeficienți piezoelectrici care au fost propuși aici, ci alții; mai mult decît atît, în locul tensorilor piezooptici se pot utiliza, să zicem, tensorii de electrostricțiune, iar în loc de tensorii piezoelectrici, tensorii electrooptici. Esența metodei nu se schimbă însă.

§ 87. RELAȚII FUNCȚIONALE ÎN FIZICA CRISTALELOR

Pînă acum am presupus că termenii liniari reprezintă mici corecții la termenii principali, liniari. Odată cu mărirea intensității solicitărilor aplicate și cu creșterea preciziei măsurătorilor, în

ecuațiile de material din fizica cristalelor apare un număr tot mai mare de termeni pătratici, cubici cît și alte corecții. În loc să se studieze însă, de pildă, dezvoltarea

$$D_i = \kappa_{ij}^{(1)} E_j + \kappa_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \kappa_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \kappa_{ijklm}^{(4)} E_j E_k E_l E_m + \dots \quad (87.1)$$

și să se analizeze ce formă anume trebuie să aibă tensorii $\kappa^{(1)}$, $\kappa^{(2)}$, $\kappa^{(3)}$, $\kappa^{(4)}$, ... pentru o clasă de simetrie dată a cristalului se poate formula, de la bun început, problema mult mai generală: care sînt restricțiile ce trebuie impuse legăturii funcționale dintre vectorul \mathbf{D} și vectorul \mathbf{E} , pentru ca această dependență să fie compatibilă cu simetria cristalului?

Complet analog, în locul analizei generalizărilor legii lui Hooke

$$\varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu}^{(1)} \sigma_\mu + s_{\lambda\mu\nu}^{(2)} \sigma_\mu \sigma_\nu + s_{\lambda\mu\nu\rho}^{(3)} \sigma_\mu \sigma_\nu \sigma_\rho + \dots \quad (87.2)$$

se poate pune problema compatibilității generale cu simetria cristalului a formei dependenței funcționale a tensorului simetric de rangul doi, de un alt tensor de același tip.

Dependența liniară a unui vector de alt vector este determinată de tensorul general de rangul doi cu simetria internă V^2 , pe cînd dependența liniară a unui tensor simetric de rangul doi de un altul, printr-un tensor cu simetria internă $[V^2]^2$. Cea mai generală formă a dependenței funcționale a unui vector față de alt vector, sau a unui tensor față de alt tensor, compatibilă cu simetria cristalului, reprezintă o generalizare tocmai a unei astfel de legături definite, în cazul liniar, de tensorii de material de tipul V^2 și, respectiv, $[V^2]^2$. Dealtfel, cele mai importante legături pentru fizica cristalelor, dintre doi vectori precum și dintre doi tensori, sînt determinate de tensorii de material simetrici, de tipul $[V^2]$ și $[[V^2]^2]$. Într-adevăr, cel puțin pentru procesele izotermice și pentru cele adiabatice, dependența liniară dintre vectorii intensitate și inducție ale cîmpului electric este definită printr-un tensor de material de tipul $[V^2]$, iar dintre tensorii tensiunilor și deformărilor, de un tensor de material de tipul $[[V^2]]$. Demonstrarea faptului că acești tensori sînt simetrici se bazează pe existența unor potențiale, adică a unor funcții scalare, de argument vectorial, $\Phi(\mathbf{E})$, și de argument tensorial, $\Phi(\boldsymbol{\sigma})$, care sînt astfel încît

$$\mathbf{D} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}}, \quad D_i = \frac{\partial \Phi(\mathbf{E})}{\partial E_i}; \quad (87.3)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad \varepsilon_\lambda = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \sigma_\lambda}. \quad (87.4)$$

Generalizînd relațiile $\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E})$ și $\varepsilon = \varepsilon(\sigma)$ pentru cazul dependențelor neliniare, vom pleca de la formulele (87.3) și (87.4). Funcția vectorială de argument vectorial, care satisface formula (87.3) și funcția tensorială de argument tensorial, care satisface formula (87.4), se numesc *funcții de potențial*. Prin urmare, pentru a explica legile fizicii cristalelor care privesc efectele esențial neliniare, trebuie cunoscute funcțiile vectoriale și tensoriale generale și cele de potențial, compatibile cu simetria cristalelor. Și anume, pentru a defini o funcție vectorială sau tensorială de potențial este suficient să fie dat potențialul, adică o funcție scalară de argument vectorial, sau tensorial: $\Phi(\mathbf{E})$ sau $\Phi(\sigma)$.

În tabelul 87.1 este dată forma funcțiilor scalare și vectoriale de argument vectorial, compatibile cu simetria celor 32 clase cristalografice și pentru cele 7 clase limită, iar în tabelul 87.2 forma funcțiilor scalare care au ca argument un tensor simetric de rangul doi. Metodele de determinare a acestor funcții sînt complicate, astfel încît nu le vom examina aici (v. Smith, 1962 ; Sirotin, 1964 și 1965 ; Pleșakov și Sirotin, 1966). Vom analiza numai modul în care sînt întocmite tabelele și care este informația ce se poate extrage din ele.

În tabelul 87.1 clasele limită cristalografice sînt grupate în serii. Fiecărei serii îi este atribuită denumirea clasei superioare care intră în ea. Toate clasele care fac parte din aceeași serie au invarianții vectoriali principali de același fel — ei sînt enumerați în paranteze, după denumirea seriei. Acești invarianți principali au rolul de argumente ale funcțiilor arbitrare, f, f_0, f_1, \dots . De exemplu, seria $mm2$ are invarianții principali A_z, A_x^2 și A_y^2 .

Pentru clasa principală a seriei, oricare funcție scalară de argument vectorial, care este invariantă la grupul său de simetrie, poate fi exprimată ca funcție de invarianții principali. Aceasta se scrie sub forma $\Phi = f$ și înseamnă că, pentru clasa $mm2$ potențialul vectorial general este

$$\Phi = f(A_z, A_x^2, A_y^2), \quad (87.5)$$

unde f este o funcție arbitrară de argumentele sale. Astfel, oricare invariant vectorial al grupului $mm2$ poate fi reprezentat ca funcție de invarianții A_z, A_x^2, A_y^2 .

Pentru celelalte clase ale seriei, invarianții vectoriali nu se reduc la cei principali. De exemplu, pentru clasa 2, care face parte din seria $mm2$, acest invariant suplimentar este $A_x A_y$. El nu poate fi dedus din invarianții principali (se poate arăta că el este egal cu rădăcina pătrată din produsul dintre invarianții principali al doilea și al treilea, însă acest lucru nu este adevărat: $\sqrt{A_x^2 A_y^2} = |A_x A_y|$), pătratul lui fiind însă o funcție de invarianții

Potențialele vectoriale, $\Phi(A)$, și funcțiile vectoriale generale, $V(A)$, compatibile cu simetria cristalelor și texturilor

Seria 1, $f = f(A_x, A_y, A_z)$:

clasa 1: $\Phi = f$, $V = f_1 \mathbf{i} + f_2 \mathbf{j} + f_3 \mathbf{k}$.

Seria m, $f = f(A_x, A_y, A_z^2)$:

clasa m ($m \perp Z$): $\Phi = f$, $V = f_1 \mathbf{i} + f_2 \mathbf{j} + A_z f_3 \mathbf{k}$.

Seria mm2, $f = f(A_z, A_x^2, A_y^2)$:

clasa mm2: $\Phi = f$, $V = f_1 \mathbf{k} + A_x f_2 \mathbf{i} + A_y f_3 \mathbf{j}$:

clasa 2 ($2 \parallel Z$): $\Phi = f_0 + A_x A_y f_1$, $V = V(mm2) + A_y f_4 \mathbf{i} + A_x f_5 \mathbf{j} + A_x A_y f_6 \mathbf{k}$.

Seria mmm, $f = f(A_x^2 + A_y^2 + A_z^2)$:

clasa mmm: $\Phi = f$, $V = A_x f_1 \mathbf{i} + A_y f_2 \mathbf{j} + A_z f_3 \mathbf{k}$;

clasa 222: $\Phi = f_0 + A_x A_y A_z f_1$, $V = V(mmm) + A_y A_z f_4 \mathbf{i} + A_z A_x f_5 \mathbf{j} + A_x A_y f_6 \mathbf{k}$;

clasa 2/m ($2 \parallel Z$): $\Phi = f_0 + A_x A_y f_1$, $V = V(mmm) + A_y f_4 \mathbf{i} + A_x f_5 \mathbf{j} + A_x A_y A_z f_6 \mathbf{k}$;

clasa $\bar{1}$: $\Phi = f_0 + A_y A_z f_1 + A_z A_x f_2 + A_x A_y f_3$, $V = V(2/m) +$

$+ A_x f_7 \mathbf{k} + A_y f_8 \mathbf{k} + A_z f_9 \mathbf{i} + A_z f_{10} \mathbf{j} + A_x A_y A_z f_{11} \mathbf{i} + A_x A_y A_z f_{12} \mathbf{j}$.

Seria 4mm, $f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2, A_x^2 A_y^2)$:

clasa 4mm: $\Phi = f$, $V = f_1 \mathbf{k} + f_2 (A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j}) + A_x A_y f_3 (A_y \mathbf{i} + A_x \mathbf{j})$;

clasa 4: $\Phi = f_0 + A_x A_y (A_x^2 - A_y^2) f_1$, $V = V(4mm) +$

$+ f_2 (A_y \mathbf{i} - A_x \mathbf{j}) + A_x A_y f_3 (A_x \mathbf{i} - A_y \mathbf{j}) + A_x A_y (A_x^2 - A_y^2) f_4 \mathbf{k}$.

Seria 4/mmm, $f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2, A_x^2 A_y^2)$:

clasa 4/mmm: $\Phi = f$, $V = A_z f_1 \mathbf{k} + f_2 (A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j}) + A_x A_y f_3 (A_y \mathbf{i} + A_x \mathbf{j})$;

clasa 422 : $\Phi = f_0 + A_x A_y A_z (A_x^2 - A_y^2) f_1$, $V = V(4/mmm) +$

$$+ A_z f_4 (A_y i - A_x j) + A_x A_y (A_x^2 - A_y^2) f_5 k + A_x A_y A_z f_6 (A_x i - A_y j);$$

clasa $\bar{4}2m$: $\Phi = f_0 + A_x A_y A_z f_1$, $V = V(4/mmm) + A_x A_y f_4 k +$

$$+ A_z f_5 (A_y i + A_x j) + A_x A_y A_z f_6 (A_x i + A_y j);$$

clasa $4/m$: $\Phi = f_0 + A_x A_y (A_x^2 - A_y^2) f_1$, $V = V(4/mmm) +$

$$+ f_4 (A_y i - A_x j) + A_x - A_y f_5 (A_x i - A_y j) + A_x A_y A_z (A_x^2 - A_y^2) f_6 k;$$

clasa $\bar{4}$: $\Phi = \Phi(4/m) + A_x A_y A_z f_2 + A_z (A_x^2 - A_y^2) f_3$, $V = V(4/m) +$

$$+ (A_x^2 - A_y^2) f_7 k + A_x A_y f_8 k + A_z f_9 (A_x i - A_y j) + A_z f_{10} (A_y i + A_x j) +$$

$$+ A_x A_y A_z f_{11} (A_x i + A_y j) + A_x A_y A_z f_{12} (A_y i - A_x j).$$

$$\text{Seria } 3m, f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2, A_y^3 - 3A_x^2 A_y);$$

clasa $3m (m \perp X)$: $\Phi = f$, $V = f_1 k + f_2 (A_x i + A_y j) +$

$$+ f_3 (2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j);$$

clasa 3 : $\Phi = f_0 + (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_1$, $V = V(3m) + f_4 (A_y i - A_x j) +$

$$+ f_5 (A_x^2 i - A_y^2 i - 2A_x A_y j) + (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_6 k.$$

$$\text{Seria } \bar{6}2m, f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2, A_x^3 - 3A_x A_y^2);$$

clasa $\bar{6}2m (2 \parallel X)$: $\Phi = f$, $V = A_z f_1 k + f_2 (A_x i + A_y j) +$

$$+ f_3 (A_x^2 i - A_y^2 i - 2A_x A_y j);$$

clasa 32 $(2 \parallel X)$: $\Phi = f_0 + A_z (A_y^3 - 3A_x^2 A_y) f_1$, $V = V(\bar{6}2m) +$

$$+ A_z f_4 (A_y i - A_x j) + A_z f_5 (2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) + (A_y^3 - 3A_x^2 A_y) f_6 k;$$

clasa $\bar{6}$: $\Phi = f_0 + (A_y^3 - 3A_x^2A_y) f_1$, $V = V(\bar{6}2m) + f_4(A_y i - A_x j) +$
 $+ f_5(2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y) f_6 k$.

Seria 6mm, $f = f(A_x, A_x^2 + A_y^2, A_x^6 - 15A_x^4A_y^2 + 15A_x^2A_y^4 - A_y^6)$:

clasa 6mm: $\Phi = f$, $V = f_1 k + f_2(A_x i + A_y j) +$
 $+ (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_3(A_x^2 i - A_y^2 i - 2A_x A_y j)$;

clasa 6: $\Phi = f_0 + (3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_1$, $V = V(6mm) +$
 $+ f_4(A_y i - A_x j) + (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_5(2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) +$
 $+ (3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_6 k$.

Seria 6/mmm, $f = f(A_x^2, A_x^2 + A_y^2, A_x^6 - 15A_x^4A_y^2 + 15A_x^2A_y^4 - A_y^6)$:

clasa 6/mmm: $\Phi = f$, $V = A_z f_1 k + f_2(A_x i + A_y j) +$
 $+ (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_3(A_x^2 i - A_y^2 i - 2A_x A_y j)$,

clasa 6/m: $\Phi = f_0 + (3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_1$, $V = V(6/mmm) +$
 $+ f_4(A_y i - A_x j) + (A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_5(2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) +$
 $+ A_z(3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_6 k$;

clasa 622: $\Phi = f_0 + A_z(3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_1$, $V = V(6/mmm) +$
 $+ A_z f_4(A_y i - A_x j) + A_z(A_x^3 - 3A_x A_y^2) f_5(2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) +$
 $+ (3A_x^5 A_y - 10A_x^3 A_y^3 + 3A_x A_y^5) f_6 k$;

clasa $\bar{3}m$ ($m \perp X$): $\Phi = f_0 + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y) f_1$, $V = V(6/mmm) +$
 $+ A_z f_4(2A_x A_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) + (A_y^3 - 3A_x^2A_y) f_5 k +$
 $+ A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y) f_6(A_x i + A_y j)$;

clasa $\overline{3}$: $\Phi = \Phi(6/m) + A_z(A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_2 + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_3,$

$$\begin{aligned} V &= V(6/m) + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_7k + (A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_8k + \\ &+ A_zf_9(2A_xA_yi + A_x^2j - A_y^2j) + A_zf_{10}(A_x^2i - A_y^2i - 2A_xA_yj) + \\ &+ A_z(A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_{11}(A_xi + A_yj) + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_{12}(A_xi + A_yj). \end{aligned}$$

Seria $\overline{43m}$, $f = f(\Sigma A_x^2, A_xA_yA_z, \Sigma A_y^2A_z^2)$:

clasa $\overline{43m}$: $\Phi = f$, $V = f$, $\Sigma A_xi + f_2 \Sigma A_yA_zi + f_3 \Sigma A_x^3i$;

clasa 23 : $\Phi = f_0 + (A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1$, $V = V(\overline{43m}) +$
 $+ f_4 \Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i + f_5 \Sigma A_yA_z(A_y^2 - A_z^2)i + f_6 \Sigma A_x^3(A_y^2 - A_z^2)i.$

Seria $m3m$, $f = f(\Sigma A_x^2, \Sigma A_y^2A_z^2, A_x^2A_y^2A_z^2)$:

clasa $m3m$: $\Phi = f$, $V = f_1 \Sigma A_xi + f_2 \Sigma A_x^3i + A_xA_yA_zf_3 \Sigma A_yA_zi$;

clasa $m3$: $\Phi = f_0 + (A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1$, $V = V(m3m) +$
 $+ f_4 \Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i + A_xA_yA_zf_5 \Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i +$
 $+ [\Sigma A_x^4(A_y^2 - A_z^2)]f_6 \Sigma A_xi$;

clasa 432 : $\Phi = f_0 + A_xA_yA_z(A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1,$

$$\begin{aligned} V &= V(m3m) + f_4 \Sigma A_yA_z(A_y^2 - A_z^2)i + A_xA_yA_zf_5 \Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i + \\ &+ A_xA_yA_zf_6 \Sigma A_x^3(A_y^2 - A_z^2)i. \end{aligned}$$

Seria ∞m , $f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2)$:

clasa ∞m : $\Phi = f$, $V = f_1k + f_2(A_xi + A_yj)$;

clasa ∞ : $\Phi = f$, $V = V(\infty m) + f_3(A_yi - A_xj).$

Seria ∞/mm , $f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2)$;

clasa ∞/mm : $\Phi = f$, $V = A_z f_1 k + f_2 (A_x i + A_y j)$;

clasa $\infty 2$: $\Phi = f$, $V = V(\infty/mm) + A_z f_3 (A_y i - A_x j)$;

clasa ∞/m : $\Phi = f$, $V = V(\infty/mm) + f_3 (A_y i - A_x j)$.

Seria $\infty\infty m$, $f = f(\Sigma A_x^2)$:

clasele $\infty\infty\infty m$ și $\infty\infty\infty$: $\Phi = f$, $V = f \Sigma A_x i$.

Observații. 1. Pentru simplificarea scrierii, termenii scriși deja în una dintre formulele precedente sînt notați cu simbolurile $V(mm2)$, $V(mmm)$ etc.

2. Semnul Σ din formulele pentru seriile $43m$, $m3m$ și $\infty\infty\infty m$ înseamnă însumarea în raport cu permutarea ciclică a indicilor x, y, z și a versorilor i, j, k ; de exemplu, $\Sigma A_y A_z i = A_y A_z i + A_z A_x j + A_x A_y k$.

principali (și anume, de produsul dintre invariantii principali A_x^2 și A_y^2). De aici rezultă că oricare dintre funcțiile de invariantii principali precum și de invariantul suplimentar poate fi scrisă sub forma

$$\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2, A_x A_y) = f_0(A_z, A_x^2, A_y^2) + A_x A_y f_1(A_z, A_x^2, A_y^2); \quad (87.6)$$

iar această formă de scriere este reprezentată în tabel sub forma

$$\Phi = f_0 + A_x A_y f_1.$$

Avantajul cel mai important al acestei forme de scriere este univocitatea ei. Într-adevăr, funcțiile f_0 și f_1 se definesc din funcțiile Φ într-un mod unic. Funcția f_0 este componenta pară față de $A_x A_y$ a funcției Φ , iar $A_x A_y f_1$ componenta impară; de aceea

$$f_0 = \frac{1}{2} [\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; A_x A_y) + \Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; -A_x A_y)],$$

$$f_1 = \frac{1}{2A_x A_y} [\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; A_x A_y) - \Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; -A_x A_y)].$$

Conform tabelului 87.1, pentru clasa $mm2$ funcția vectorială generală are forma

$$V = A_x f_1 i + A_y f_2 j + f_3 k, \quad (87.7)$$

iar cea potențială, după cum rezultă din relațiile (87.3) și (87.4), forma

$$V = \frac{\partial f}{\partial A_x} i + \frac{\partial f}{\partial A_y} j + \frac{\partial f}{\partial A_z} k, \quad (87.8)$$

unde f_1, f_2, f_3 și f sînt funcții arbitrare de invarianții principali A_x, A_y^2 și A_z^2 . Pentru clasa 2, funcția vectorială generală este de forma

$$V = (A_x f_1 + A_y f_2) i + (A_x f_3 + A_y f_4) j + (f_5 + A_x A_y f_6) k \quad (87.9)$$

(în tabel, pentru simplificare, o parte dintre termeni este notată cu $V(mm2)$); aici toți termenii sînt scriși sub formă explicită și sînt indexate funcțiile arbitrare f_α ; subliniem că funcția f_1 din această expresie nu coincide cu funcția cu același indice din relația (87.6)), iar cea de potențial, forma

$$V = \frac{\partial \Phi}{\partial A_x} i + \frac{\partial \Phi}{\partial A_y} j + \frac{\partial \Phi}{\partial A_z} k, \quad (87.10)$$

unde

$$\Phi = f_0 + A_x A_y f_1;$$

aici toți f_α sînt funcții ale invarianților principali (indexarea funcțiilor f din expresiile pentru Φ și pentru V se face independent astfel încît coincidenței indicilor funcțiilor din aceste expresii nu trebuie să i se dea nici o importanță).

Așa cum s-a remarcat deja, în tabelele 87.1 și 87.2 sînt date formele cele mai generale ale legăturii funcționale, compatibile cu simetriile cristalelor. Însă dintre toate funcțiile scalare posibile, de argument vectorial sau tensorial, un loc deosebit de important îl ocupă funcțiile raționale întregi, adică acele funcții pentru care componentele funcției sînt polinoame în componentele argumentului (v. Döring, 1958; Smith, Smith and Rivlin, 1963; Smith and Rivlin, 1964; Smith and Kiral, 1969).

Să revenim din nou la tabelul 87.1. Vom lua ca exemplu clasa $42m$ din seria $4/mmm$. Să examinăm funcțiile vectoriale generale și funcțiile vectoriale de potențial, care să fie funcții întregi, raționale, de gradul patru.

Funcția vectorială generală, $V = V(A)$, care concordă cu simetria cristalului, după cum rezultă din tabelul 87.1, are forma

$$V = (A_z f_1 + A_x A_y f_2) \mathbf{k} + (f_3 + A_x A_y A_z f_4) (A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j}) + (A_z f_5 + A_x A_y f_6) (A_y \mathbf{i} + A_x \mathbf{j}). \quad (87.11)$$

Pentru ca în componentele V_i să existe toți termenii necesari, pînă la termenii de gradul patru în componenta A_k inclusiv, trebuie ca în funcțiile f_α să fie prezenți toți termenii, pînă la inclusiv gradul :

Funcția	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
Gradul	3	2	3	0	2	1

În acest caz drept invarianti principali servesc $A_x^2 + A_y^2$, A_z^2 și $A_x^2 A_y^2$. Deoarece toți aceștia sînt de grad par în raport cu A , termenii de grad impar din funcțiile f_α sînt identic egali cu zero. Forma generală a funcțiilor f_α este

$$\begin{aligned} f_1 &= a_1 + c_1(A_x^2 + A_y^2) + c_2 A_z^2, \\ f_2 &= b_1 + d_1(A_x^2 + A_y^2) + d_2 A_z^2, \\ f_3 &= a_2 + c_3(A_x^2 + A_y^2) + c_4 A_z^2, \\ f_4 &= d_3, \\ f_5 &= b_2 + d_4(A_x^2 + A_y^2) + d_5 A_z^2, \\ f_6 &= c_5, \end{aligned} \quad (87.12)$$

unde a_1, \dots, d_5 sînt niște constante. Componentele funcției vectoriale $V(A)$, compatibilă cu simetria clasei $\bar{4}2m$, reprezintă coeficienții versorilor \mathbf{i} , \mathbf{j} și, respectiv, \mathbf{k}

$$\begin{aligned} V_x &= A_x f_3 + A_x^2 A_y A_z f_4 + A_y A_z f_5 + A_x A_y^2 f_6, \\ V_y &= A_y f_3 + A_x A_y^2 A_z f_4 + A_x A_z f_5 + A_z^2 A_y f_6, \\ V_z &= A_z f_1 + A_x A_y f_2. \end{aligned} \quad (87.13)$$

Înlocuind în aceste formule dezvoltările funcției f_α , scrise în (87.12), obținem

$$\begin{aligned}
 V_x &= a_2 A_x + b_2 A_y A_z + c_3 A_x (A_x^2 + A_y^2) + c_4 A_x A_z^2 + \\
 &\quad + c_5 A_x A_y^2 + d_3 A_x^2 A_y A_z + d_4 (A_x^2 + A_y^2) A_y A_z + d_5 A_y A_z^3, \\
 V_y &= a_2 A_y + b_2 A_x A_z + c_3 A_y (A_x^2 + A_y^2) + c_4 A_y A_z^2 + \\
 &\quad + c_5 A_x^2 A_y + d_3 A_x A_y^2 A_z + d_4 A_x (A_x^2 + A_y^2) A_z + d_5 A_x A_z^3, \quad (87.14) \\
 V_z &= a_1 A_z + b_1 A_x A_y + c_1 (A_x^2 + A_y^2) A_z + c_2 A_z^3 + \\
 &\quad + d_1 A_x A_y (A_x^2 + A_y^2) + d_2 A_x A_y A_z^2.
 \end{aligned}$$

O astfel de funcție vectorială, rațională, întreagă, generală, de gradul patru este compatibilă cu simetria cristalelor din clasa $42m$.

Să construim acum funcția vectorială de potențial, de același grad. Pentru aceasta este necesar să transcriem potențialul pînă la termenii de gradul cinci inclusiv. Conform tabelului 87.1, pentru clasa $42m$, potențialul este egal cu

$$\Phi = f_0 + A_x A_y A_z f_1. \quad (87.15)$$

Pentru a obține toți termenii care ne interesează, în expresia funcției f_0 trebuie scriși și termenii pînă la gradul patru, iar în expresia lui f_1 pînă la termenii de gradul doi inclusiv

$$\begin{aligned}
 f_0 &= h_1 + l_1 (A_x^2 + A_y^2) + l_2 A_z^2 + n_1 A_x^2 A_y^2 + \\
 &\quad + n_2 (A_x^2 + A_y^2)^2 + n_3 (A_x^2 + A_y^2) A_z^2 + n_4 A_z^4, \quad (87.16) \\
 f_1 &= m_1 + p_1 (A_x^2 + A_y^2) + p_2 A_z^2.
 \end{aligned}$$

Înlocuind aceste expresii în (87.15), obținem potențialul

$$\begin{aligned}
 \Phi &= h_1 + l_1 (A_x^2 + A_y^2) + l_2 A_z^2 + m A_x A_y A_z + n_1 A_x^2 A_y^2 + n_2 (A_x^2 + \\
 &\quad + A_y^2)^2 + n_3 (A_x^2 + A_y^2) A_z^2 + n_4 A_z^4 + p_1 A_x A_y (A_x^2 + A_y^2) A_z + \\
 &\quad + p_2 A_x A_y A_z^3. \quad (87.17)
 \end{aligned}$$

Derivatele potențialului sînt egale cu componentele funcției vectoriale de potențial

$$\begin{aligned}
 V_x &= \frac{\partial \Phi}{\partial A_x} = 2l_1 A_x + m_1 A_y A_z + 2n_1 A_x A_y^2 + 4n_2 A_x (A_x^2 + A_y^2) + \\
 &\quad + 2n_3 A_x A_z^2 + p_1 (3A_x^2 + A_y^2) A_y A_z + p_2 A_y A_z^3, \\
 V_y &= \frac{\partial \Phi}{\partial A_y} = 2l_1 A_y + m_1 A_x A_z + 2n_1 A_x^2 A_y + 4n_2 A_y (A_x^2 + A_y^2) + \\
 &\quad + 2n_3 A_y A_z^2 + p_1 A_x (A_x^2 + 3A_y^2) A_z + p_2 A_x A_z^3, \\
 V_z &= \frac{\partial \Phi}{\partial A_z} = 2l_2 A_z + m_1 A_x A_y + 2n_3 (A_x^2 + A_y^2) A_z + \\
 &\quad + 4n_3 A_z^3 + p_1 A_x A_y (A_x^2 + A_y^2) + 3p_2 A_x A_y A_z^2. \quad (87.18)
 \end{aligned}$$

În timp ce funcția vectorială generală de gradul patru, compatibilă cu simetria cristalelor din clasa $\bar{4}2m$, se definește cu ajutorul a paisprezece coeficienți constanți, funcția de potențial analoagă are nevoie numai de nouă. Prin urmare, pentru ca funcția vectorială, de gradul patru, cu simetria $\bar{4}2m$, să fie potențială coeficienții ei trebuie să satisfacă cinci condiții. Aceste condiții sînt ușor de găsit, comparînd formulele (87.14) și (87.18)

$$\begin{aligned}
 b_1 &= b_2, \quad c_1 = c_4, \\
 2d_1 &= d_3 = 2d_4, \quad d_2 = 3d_5. \quad (87.19)
 \end{aligned}$$

Funcțiile vectoriale raționale întregi sînt strîns legate de dezvoltările vectoriale de forma (87.1). Să examinăm o astfel de dezvoltare a funcției vectoriale, $V(A)$

$$V_i = T_i^{(1)} + T_{ij}^{(2)} A_j + T_{ijk}^{(3)} A_j A_k + T_{ijkl}^{(4)} A_j A_k A_l + T_{ijklm}^{(5)} A_j A_k A_l A_m. \quad (87.20)$$

Aici tensorii $T^{(1)}, \dots, T^{(5)}$ joacă rolul unor tensori de material. Simetria internă a tuturor tensorilor este $V[V^{n-1}]$; ei sînt simetrici în raport cu toți indicii, în afară de primul. Componentele lor pot

fi calculate prin derivarea funcției $V(A)$ în punctul $A = 0$, și anume

$$\begin{aligned} T_i^{(1)} &= (V_i)_{A=0}, & T_{ij}^{(2)} &= \left(\frac{\partial V_i}{\partial A_j} \right)_{A=0}, \\ T_{ijk}^{(3)} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V_i}{\partial A_j \partial A_k} \right)_{A=0}, & T_{ijkl}^{(4)} &= \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 V_i}{\partial A_j \partial A_k \partial A_l} \right)_{A=0}, \\ T_{ijklm}^{(5)} &= \frac{1}{4!} \left(\frac{\partial^4 V_i}{\partial A_j \partial A_k \partial A_l \partial A_m} \right)_{A=0}. \end{aligned} \quad (87.21)$$

Evident, pentru orice n ,

$$T_{i_1 \dots i_n}^{(n)} = \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{\partial^{n-1} V_{i_1}}{\partial A_{i_2} \dots \partial A_{i_n}} \right)_{A=0}. \quad (87.22)$$

Folosind aceste formule, se pot găsi componentele tensorilor $T^{(n)}$, invariante în raport cu grupurile punctuale date, formate din funcții vectoriale raționale, întregi, construite cu ajutorul tabelului 87.1. De exemplu, cu ajutorul dezvoltării (87.14) se pot găsi componentele tensorilor $T^{(n)}$, invariante față de grupul $\bar{4}2m$. Să facem acest lucru.

Evident,

$$T_i^{(1)} = 0, \quad (i = 1, 2, 3). \quad (87.23)$$

Acest fapt nici nu este de mirare, $\bar{4}2m$ fiind o clasă nepiroelectrică.

Să găsim componentele tensorului $T^{(2)}$. Dintre ele sînt diferite de zero numai

$$T_{11} = \frac{\partial V_x}{\partial A_x} = a_2, \quad T_{22} = \frac{\partial V_y}{\partial A_y} = a_2, \quad T_{33} = \frac{\partial V_z}{\partial A_z} = a_1 \quad (87.24)$$

(pentru a apărea notațiile obișnuite ale componentelor tensoriale, indicii lor literali trebuie înlocuiți cu indici numerici). Așa cum era de așteptat, toate componentele nediagonale sînt egale cu zero, iar $T_{11} = T_{22}$.

Să găsim, în continuare, componentele tensorului $T^{(3)}$; simetria lui internă este $V[V^2]$. Sînt diferite de zero componentele

$$\begin{aligned} T_{123} &= T_{132} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_x}{\partial A_y \partial A_z} = \frac{1}{2} b_2, \\ T_{231} &= T_{213} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_y}{\partial A_z \partial A_x} = \frac{1}{2} b_2, \\ T_{312} &= T_{321} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_z}{\partial A_x \partial A_y} = \frac{1}{2} b_1. \end{aligned} \quad (87.25)$$

Aşadar, am obţinut componentele tensorului coeficienţilor piezo-electrici (sau electrooptici) pentru clasa $\bar{4}2m$.

În fine, tensorul $T^{(4)}$ are diferite de zero următoarele componente

$$\begin{aligned} T_{1111} &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x^3} = c_3, \\ T_{1122} &= T_{1212} = T_{1221} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x \partial A_y^2} = \frac{1}{3} (c_3 + c_5), \\ T_{1133} &= T_{1313} = T_{1331} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x \partial A_z^2} = \frac{1}{3} c_4, \\ T_{2112} &= T_{2121} = T_{2211} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_x^2 \partial A_y} = \frac{1}{3} (c_3 + c_5), \\ T_{2222} &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_y^3} = c_3, \\ T_{2233} &= T_{2323} = T_{2332} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_y \partial A_z^2} = \frac{1}{3} c_4, \\ T_{3113} &= T_{3131} = T_{3311} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_x^2 \partial A_z} = \frac{1}{3} c_1, \\ T_{3223} &= T_{3232} = T_{3322} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_y^2 \partial A_z} = \frac{1}{3} c_1, \\ T_{3333} &= \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_z^3} = c_2. \end{aligned} \quad (87.26)$$

Simetria internă a acestui tensor este egală cu $V[V^3]$. El poate descrie, de exemplu, polarizabilitatea cubică și, respectiv, generarea armonice luminoase de ordinul trei, în cristalele din clasele 422 , $4mm$, $\bar{4}2m$ și $4/mmm$ (deoarece acest tensor este de tip par, el are aceeași formă pentru toate clasele care fac parte dintr-un subsistem).

Tensorul $T^{(5)}$, de simetrie internă $V[V^4]$, i se propune cititorului să-l reprezinte singur.

Funcțiile de potențial vectoriale, raționale, întregi se utilizează complet analog pentru construirea tensorilor simetrici în raport cu toți indicii.

Așadar, tabelul 87.1 permite scrierea fără nici o greutate a tensorilor nu numai de rang înalt, ci și de rang oricât de înalt, invariante în raport cu orice grup dat. Însă în locul tensorilor de material de ranguri înalte se pot utiliza și direct funcții vectoriale, raționale și întregi. Scrierea proprietăților de material cu ajutorul lor este mai compactă decât atunci când se folosesc tensorii de material; într-adevăr, formulele (87.14) sau (87.18) ocupă un loc mai restrâns decât cel necesar pentru patru tensori de rangul doi, trei, patru și cinci, care ar purta aceeași informație. În felul acesta sîntem conduși la o generalizare esențială a noțiunii de tensori de material — la ideea de funcții vectoriale sau funcții tensoriale, de material*.

Tabelul 87.2 conține potențialele unui tensor simetric de rangul doi, compatibile cu simetria cristalelor și a texturilor. Funcțiile tensoriale generale de acest tip nu au fost construite deocamdată. Forma potențialelor este aceeași pentru toate clasele care fac parte dintr-un subsistem. Subsistemele sînt grupate în serii; în cazul de față, seriile coincid cu sistemele.

Cu ajutorul acestor potențiale se obține ușor generalizarea legii lui Hooke, fie sub forma

$$\varepsilon_{\lambda} = \frac{\partial \Phi(\sigma)}{\partial \sigma_{\lambda}}, \quad (87.27)$$

fie sub forma

$$\sigma_{\lambda} = \frac{\partial \Phi(\varepsilon)}{\partial \varepsilon_{\lambda}}. \quad (87.28)$$

* Asemenea funcții își găsesc aplicație, în particular, în aparatul matematic al teoriei tranzițiilor de fază de speța a doua, exprimînd forma generală a dependenței potențialului termodinamic Φ de parametrul de disimetrie, c (v. § 66). În acest caz, pentru vectorii bîldimensionali și pentru cei tridimensionali c este suficient să se folosească tabelul 87.1 (Sirotin, 1967; Sirotin și Mihelson, 1969), însă pentru vectorii c multidimensionali este necesară aplicarea unor metode matematice speciale (Gufan și Sahnenko, 1972).

Potențialele $\Phi(B)$ ale unui tensor simetric de rangul doi, B , compatibile cu simetria cristalelor și texturilor

Seria $\bar{1}$, $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{yz}, B_{zx}, B_{xy})$;

clasele 1 și $\bar{1}$: $\Phi = f$.

Seria $2/m$, $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{xy}, B_{xz}^2, B_{yz}^2)$;

clasele 2 , m , $2/m$ ($2 \parallel Z$, $m \perp Z$): $\Phi = f_0 + B_{xz}B_{yz}f_1$

Seria mmm , $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{yz}^2, B_{zx}^2, B_{xy}^2)$;

clasele 222 , $mm2$, mmm : $\Phi = f_0 + B_{yz}B_{zx}B_{xy}f_1$.

Seria $\bar{3}m$, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy} - B_{xy}^2,$

$B_{yz}^2 + B_{zx}^2, B_{yz}^3 - 3B_{xz}^3B_{yz}, B_{xz}^3 + 6B_{xz}^2B_{yy} + 9B_{xz}B_{yy}^2 - 12B_{xz}B_{xy}^2),$

$L_1 = (B_{xx} - B_{yy})B_{yz} + 2B_{xy}B_{xz},$

$L_2 = B_{xx}B_{xz}^2 + B_{yy}B_{yz}^2 + 2B_{xz}B_{yz}B_{xy},$

$L_3 = B_{yz}[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] + 8B_{xx}B_{xy}B_{xz},$

$L_4 = (B_{xx} - B_{yy})B_{xz} - 2B_{xy}B_{yz},$

$L_5 = 3(B_{xx} - B_{yy})^2B_{xy} - 4B_{xy}^3,$

$L_6 = B_{xz}(B_{xz}^2 - 3B_{yz}^2),$

$L_7 = B_{xz}[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] - 8B_{xx}B_{xy}B_{yz},$

$L_8 = (B_{xx} - B_{yy})B_{xz}B_{yz} + B_{xy}(B_{yz}^2 - B_{xz}^2);$

clasele 3 și $\bar{3}$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^8 L_n f_n + L_1^2 f_9 + L_2 L_3 f_{10} + L_1 L_4 f_{11};$

clasele 32 , $3m$, $\bar{3}m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^3 L_n f_n + L_1^2 f_4 + L_2 L_3 f_5.$

Seria 4/mmm, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy}, B_{xx}^2, B_{zz}^2 + B_{yz}^2, B_{xz}^2B_{yz}^2)$,

$$L_1 = B_{xy}B_{xz}B_{yz},$$

$$L_2 = B_{xx}B_{yz}^2 + B_{yy}B_{xz}^2,$$

$$L_3 = B_{xy}(B_{xx} - B_{yy}),$$

$$L_4 = B_{xy}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2),$$

$$L_5 = B_{xz}B_{yz}(B_{xx} - B_{yy}),$$

$$L_6 = B_{xz}B_{yz}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2);$$

clasele 4, $\bar{4}$, 4/m: $\Phi = f_0 \sum_{n=1}^6 L_n f_n + L_1 L_2 f_7$;

clasele 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm: $\Phi = f_0 + L_1 f_1 + L_2 f_2 + L_1 L_2 f_3$.

Seria 6/mmm, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy} - B_{xy}^2, B_{xz}^2 + B_{yz}^2,$

$$B_{xx}^3 + 6B_{xx}^2B_{yy} + 9B_{xx}B_{yy}^2 - 12B_{xx}B_{xy}^2, B_{xz}^6 - 6B_{xz}^4B_{yz}^2 + 9B_{xz}^2B_{yz}^4),$$

$$L_1 = B_{xx}B_{yz}^2 + B_{yy}B_{xz}^2 - 2B_{xy}B_{xz}B_{yz},$$

$$L_2 = B_{xx}(B_{xz}^4 + 3B_{yz}^4) + 2B_{yy}B_{xz}^2(B_{xz}^2 + 3B_{yz}^2) - 8B_{xy}B_{xz}^3B_{yz},$$

$$L_3 = B_{xz}^2[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{xy}^2 - B_{xz}^2)] -$$

$$- 2B_{xx}[(B_{xx} + 3B_{yy})(B_{xz}^2 + B_{yz}^2) - 4B_{xy}B_{xz}B_{yz}],$$

$$L_4 = B_{xy}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2) + (B_{yy} - B_{xx})B_{xz}B_{yz},$$

$$L_5 = 3B_{xy}(B_{xx} - B_{yy})^2 - 4B_{xx}^3,$$

$$L_6 = B_{xz}B_{yz}[3(B_{xz}^2 - B_{yz}^2)^2 - 4B_{xz}^2B_{yz}^2],$$

$$L_7 = B_{xz}B_{yz}[(B_{xx} + B_{yy})^3 - 4(B_{xy}^2 - B_{xz}^2)] + 4B_{xx}B_{xy}(B_{yz}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_8 = B_{xy}[(B_{xz}^2 + B_{yz}^2)^2 + 4B_{yz}^2(B_{xz}^2 - B_{yz}^2)] - 4B_{xz}^3B_{yz}(B_{xx} - B_{yy});$$

clasele 6, $\bar{6}$, $6/m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^8 L_n f_n + L_1^2 f_0 + L_2 L_3 f_{10} + L_1 L_4 f_{11}$;

clasele 622 , $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^3 L_n f_n + L_1^2 f_4 + L_2 L_3 f_5$.

Seria $m3m$, $f = (\Sigma B_{xx}, \Sigma B_{yy} B_{zz}, \Sigma B_{yz}^2, B_{xx} B_{yy} B_{zz}, B_{yz} B_{zx} B_{xy}, \Sigma B_{yz}^2 B_{zx}^2)$,

$$L_1 = \Sigma B_{xx} (B_{xy}^2 + B_{xz}^2),$$

$$L_2 = \Sigma B_{xx} B_{xy}^2 B_{xz}^2,$$

$$L_3 = \Sigma B_{yz}^2 B_{yy} B_{zz},$$

$$L_4 = \Sigma B_{xx} (B_{xy}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_5 = \Sigma B_{yy} B_{zz} (B_{yy} - B_{zz}),$$

$$L_6 = \Sigma B_{yz}^2 (B_{yz}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_7 = \Sigma B_{yy} B_{zz} (B_{xy}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_8 = 2 B_{xy}^2 B_{xz}^2 (B_{yy} - B_{zz}) :$$

clasele 23 și $m3$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^8 L_n f_n + L_1^2 f_0 + L_2 L_3 f_{10} + L_1 L_4 f_{11}$;

clasele 432 , $\bar{4}3m$ și $m3m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^3 L_n f_n + L_1^2 f_4 + L_2 L_3 f_5$.

Seria ∞/m , $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx} B_{yy} - B_{xy}^2,$

$$B_{xz}^2 + B_{yz}^2, 2 B_{xy} B_{xz} B_{yz} - B_{xx} B_{yz}^2 - B_{yy} B_{xz}^2) ;$$

clasele ∞ și ∞/m : $\Phi = f_0 + [(B_{xx} - B_{yy}) B_{xz} B_{yz} - B_{xy} (B_{xz}^2 - B_{yz}^2)] f_1$;

clasele $\infty 2$, ∞m și ∞/m : $\Phi = f$.

Seria $\infty\infty\infty m$, $f = f(\Sigma B_{xx}, \Sigma(B_{yy}B_{zz} - B_{xy}B_{xz}),$

$$B_{xx}B_{yy}B_{zz} + 2B_{yz}B_{zx}B_{xy} - \Sigma B_{xx}B_{yz}^2);$$

clasele $\infty\infty\infty$ și $\infty\infty\infty m$: $\Phi = f$.

Observație. Semnul Σ din formulele pentru seriile $m3m$ și $\infty\infty\infty m$ indică însumarea după permutările ciclice ale indicilor, x, y, z .

În acest caz, firește, este necesar să avem în vedere regulile de indexare

$$\sigma_\lambda = \sigma_{ij} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6), \quad (87.29)$$

$$\varepsilon_\lambda = \begin{cases} \varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2\varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6); \end{cases} \quad (87.30)$$

de exemplu, scriind potențialul $\Phi(\varepsilon) = \Phi(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_6)$, în locul lui B_{xx} trebuie scris ε_1 , însă în locul lui B_{xy} trebuie introdus $1/2 \varepsilon_6$.

Potențialele tensoriale astfel scrise pot fi utilizate și pentru deducerea formei tensorilor ce caracterizează corecțiile la legea Hooke, adică a tensorilor $s^{(2)}, s^{(3)}, \dots$ din dezvoltarea (87.2) și a tensorilor $c^{(2)}, c^{(3)}, \dots$ din dezvoltarea

$$\sigma_\lambda = c_{\lambda\mu}^{(1)} \varepsilon_\mu + c_{\lambda\mu\nu}^{(2)} \varepsilon_\mu \varepsilon_\nu + c_{\lambda\mu\nu\kappa}^{(3)} \varepsilon_\mu \varepsilon_\nu \varepsilon_\kappa + \dots \quad (87.31)$$

pentru cristalele din orice clasă (mai exact, din orice subsistem). Anume, pentru determinarea coeficienților $s_{\lambda\mu\nu}^{(2)}$ și $c_{\lambda\mu\nu}^{(2)}$, sînt necesare potențiale care se exprimă prin polinoame de gradul trei în componentele tensoriale, iar pentru calcularea coeficienților $s_{\lambda\mu\nu\kappa}^{(3)}$ și $c_{\lambda\mu\nu\kappa}^{(3)}$ — polinoame de gradul patru.

De exemplu, cu o precizie de pînă la termenii de gradul trei inclusiv, potențialul $\Phi(\sigma)$ pentru cristalele din subsistemul principal al sistemului cubic este egal cu

$$\begin{aligned} \Phi(\sigma) = & a(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + b_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 + b_2(\sigma_2\sigma_3 + \\ & + \sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2) + b_3(\sigma_4^2 + \sigma_5^2 + \sigma_6^2) + d_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^3 + \\ & + d_2(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)(\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2) + d_3(\sigma_1 + \sigma_2 + \\ & + \sigma_3)(\sigma_4^2 + \sigma_5^2 + \sigma_6^2) + d_4\sigma_1\sigma_2\sigma_3 + d_5\sigma_4\sigma_5\sigma_6 + \\ & + d_6(\sigma_1\sigma_6^2 + \sigma_1\sigma_5^2 + \sigma_2\sigma_6^2 + \sigma_2\sigma_4^2 + \sigma_3\sigma_4^2 + \sigma_3\sigma_5^2). \end{aligned} \quad [(87.32)]$$

Evident,

$$s_{\lambda\mu\nu}^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu \partial \sigma_\nu}; \quad (87.33)$$

prin urmare, coeficienții deformabilității elastice de ordinul doi sînt

$$S_{111} = S_{222} = S_{333} = 3d_1,$$

$$S_{122} = S_{133} = S_{233} = S_{211} = S_{311} = S_{322} = 3d_1 + d_2;$$

$$S_{123} = 3d_1 + \frac{3}{2}d_2 + \frac{1}{2}d_4,$$

$$S_{144} = S_{255} = S_{366} = d_3, \quad (87.34)$$

$$S_{155} = S_{166} = S_{266} = S_{244} = S_{344} = S_{355} = d_3 + d_6,$$

$$S_{456} = \frac{1}{2}d_5;$$

toți ceilalți coeficienți (în afară de coeficienții care se deosebesc de cei scriși numai prin permutarea indicilor) sînt egali cu zero. Dealtfel, și în acest caz este mai comod să se deducă formulele care exprimă direct deformările prin tensiuni, aplicînd diferențierea potențialului

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = & a + 2b_1\sigma_1 + (2b_1 + b_2)(\sigma_2 + \sigma_3) + 3d_1\sigma_1^2 + (6d_1 + 2d_2)\sigma_1(\sigma_2 + \sigma_3) + \\ & + (3d_1 + d_2)(\sigma_2^2 + \sigma_3^2) + (6d_1 + 3d_2 + d_4)\sigma_2\sigma_3 + d_3\sigma_1^3 + d_6(\sigma_2^3 + \sigma_3^3), \end{aligned}$$

$$\epsilon_4 = 2b_3\sigma_4 + 2d_3\sigma_1\sigma_4 + (2d_3 + 2d_6)(\sigma_2 + \sigma_3)\sigma_4 + d_5\sigma_5\sigma_6; \quad (87.35)$$

formulele pentru restul componentelor se deosebesc de cele scrise numai prin permutarea ciclică a indicilor.

ANEXE

A. SISTEME DE COORDONATE CRISTALOGRAFICE ȘI CRISTALOFIZICE

Aici sînt reunite regulile de alegere a sistemelor de coordonate cristalografice și cristalofizice pentru cristalele tuturor claselor (v. §§ 4, 16, 86). În tabelul A.1 sînt date proiecțiile stereografice, care arată plasarea reciprocă a elementelor de simetrie ale unui cristal, a axelor de coordonate cristalografice și cristalofizice (Nye, 1967, anexa 2).

În tabelul A.2 sînt cuprinse regulile de alegere formulate pe cît posibil mai aproape de *IRE Standards* și care au fost analizate amănunțit în § 86 pentru sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice standard, ale tuturor celor 32 de clase, ca și regulile de alegere a modifi cației dextrogire în cele 11 clase enantio-morfe (asupra alegerii sistemelor de coordonate cristalografice în cristalele singoniilor triclinică și monoclinică, v. Delone, Padurov, Aleksandrov, 1934; Delone, Galiulin, Ștorghin, 1974).

Not a ț i i l e :

X, Y, Z — axele sistemului de coordonate cristalografic;
 X_1, X_2, X_3 — axele sistemului de coordonate cristalofizic;
 α, β, γ — unghiurile dintre direcțiile pozitive ale axelor Y și Z , Z și, respectiv, X , X și Y ;

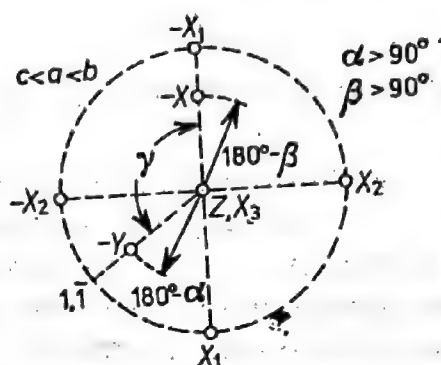
sc (sc_1) indică faptul că axa cristalografică corespunzătoare este orientată după cel mai scurt vector al rețelei; sc_2 — după cel mai scurt vector al rețelei, necolinar cu primul; sc_3 — după cel mai scurt vector al rețelei, necoplanar cu primii doi; $\perp Ysc_1$ înseamnă că axa dată este orientată după cel mai scurt dintre vectorii rețelei, perpendicular pe axa Y ; celelalte notații se înțeleg prin analogie;

$s_{\lambda\mu}$ — coeficienții deformabilității elastice, $d_{i\lambda}$ — coeficienții piezoelectrice, $\pi_{\lambda\mu}$ — coeficienții piezooptici, G — coeficientul de rotație.

Atît sistemele cristalografice cît și cele cristalofizice sînt dextrogire dacă au unghiurile dintre axele corespunzătoare (X și X_1 , Y și X_2 , Z și X_3) mai mici ca 90° . Modificațiile enantiomorfe sînt astfel amplasate față de sistemele de coordonate introduse încît una trece în cealaltă prin inversie.

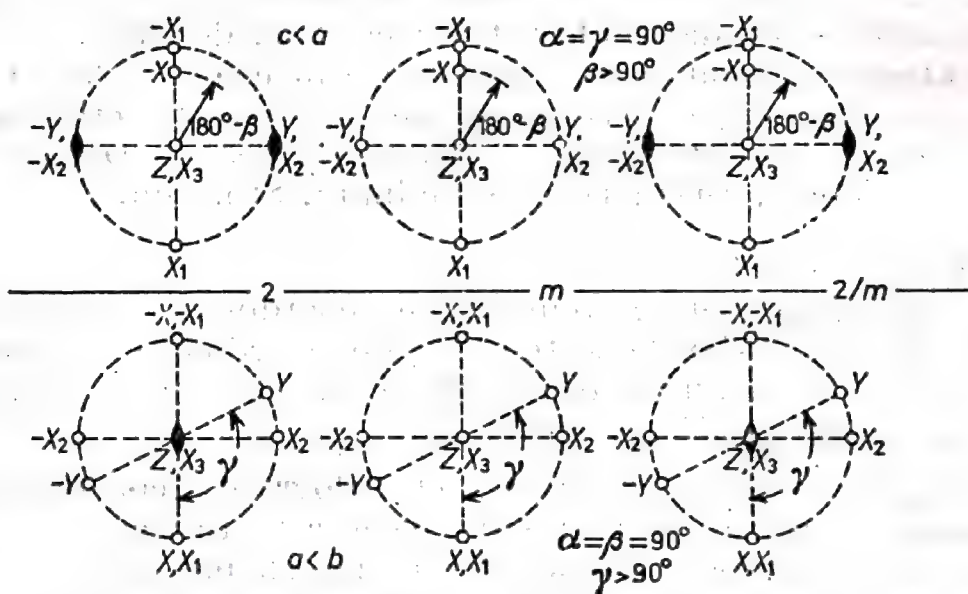
**Alegerea axelor de coordonate cristalografice și cristalofizice pentru
cristalele celor 32 de clase
(proiecții stereografice)**

Singonia triclinică

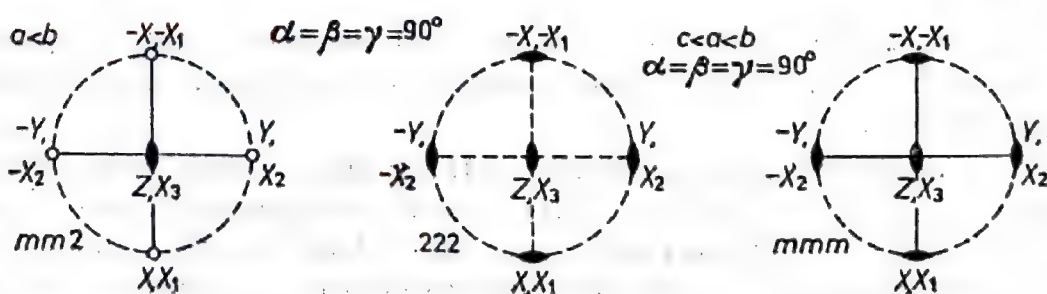


Singonia monoclinică

(sus — amplasarea admisă, jos — amplasarea modificată)

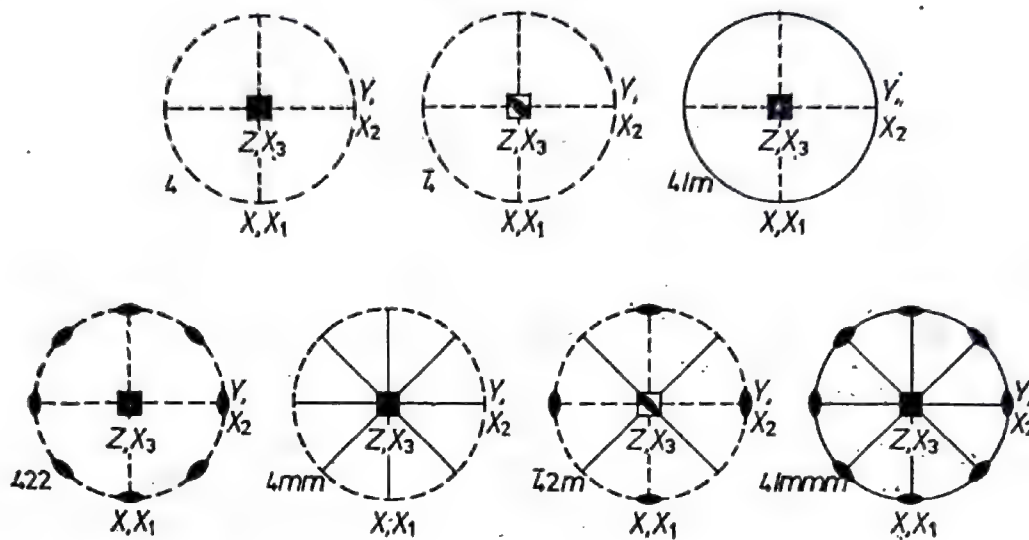


Singonia rombică



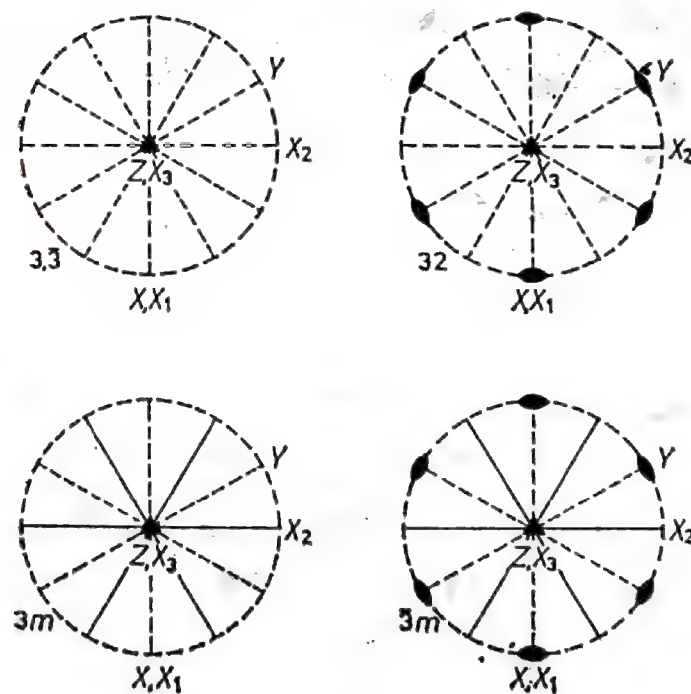
Singonia tetragonală

$$a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



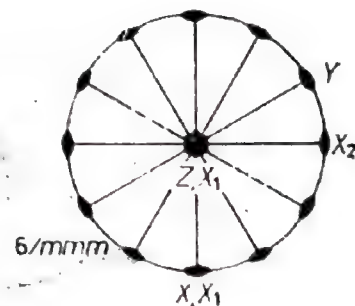
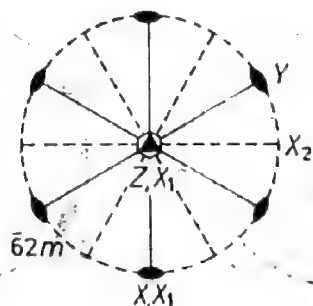
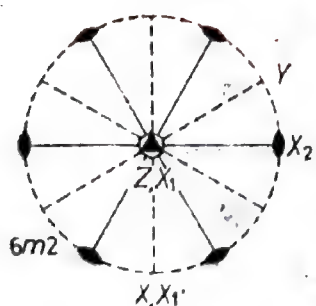
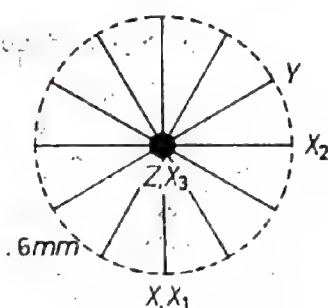
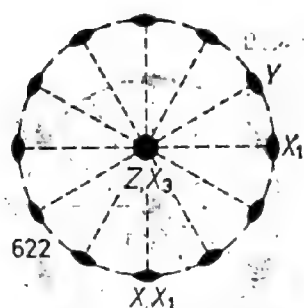
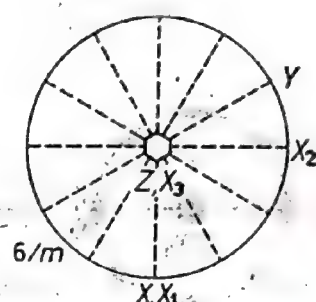
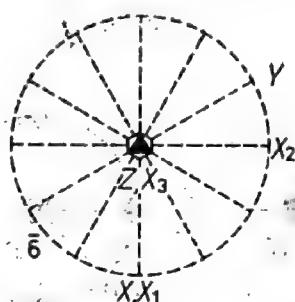
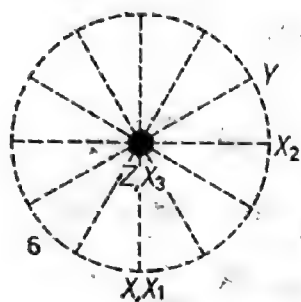
Singonia hexagonală, sistemul trigonal

$$a=b, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$$

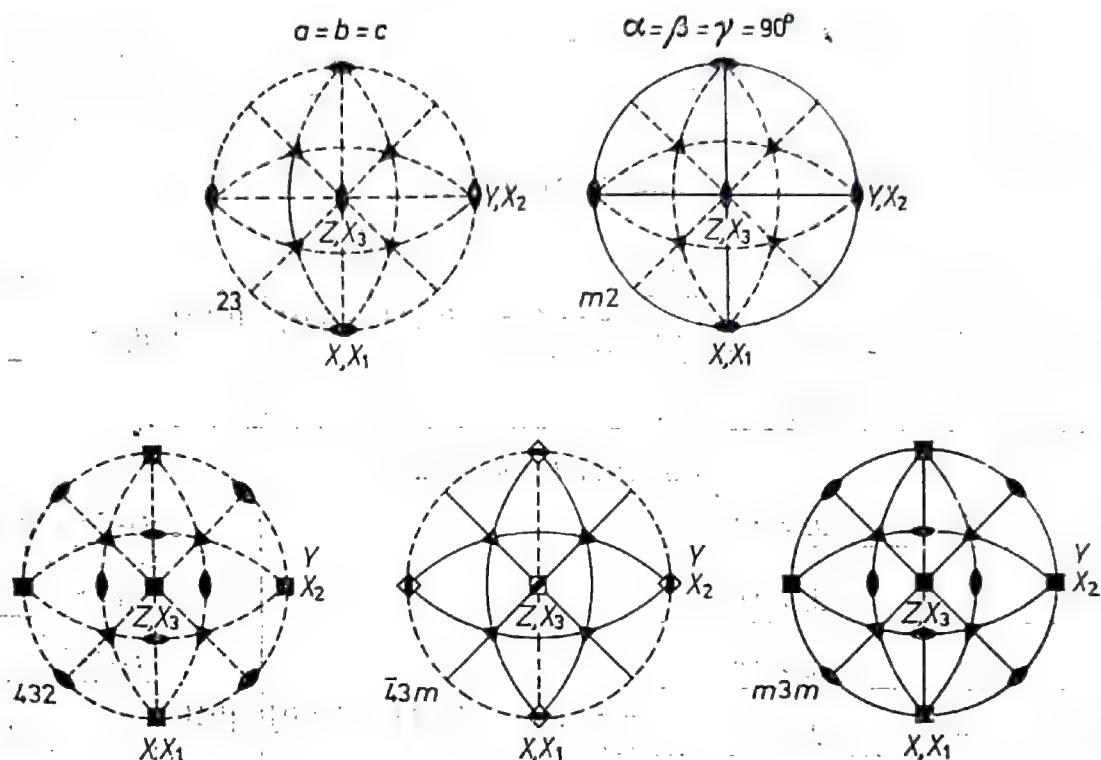


Sistemul hexagonal

$$a=b \quad \alpha=\beta=90^\circ \quad \gamma=120^\circ$$



Singonia cubică



Tabelul A.2

Regulile de alegere a sistemelor de coordonate și a modificațiilor dextrogire în cele 32 de clase cristalografice

clasa	Z [001]	X [100]	Y [010]	α, β, γ	X_3	X_1	X_2	Alegerea sistemului de coordonate	Modificația dextrogire
-------	---------	---------	---------	-------------------------	-------	-------	-------	-----------------------------------	------------------------

Singonia triclinică

1	sc_1	sc_2	sc_3	$\alpha > 90^\circ$					$d_{33} > 0$
$\bar{1}$	sc_1	sc_2	sc_3	$\beta > 90^\circ$	(001)	$b(010)$	$\perp (010)$		

Singonia monoclinică

2	$\perp Y sc_1$	$\perp Y sc_2$	$\parallel 2$	$\alpha = \gamma = 90^\circ$					$d_{32} > 0$
m	$\perp Y sc_1$	$\perp Y sc_2$	$\perp m$	$\beta > 90^\circ$	[001]	$\perp (100)$	[010]	$d_{33} > 0$	
$2/m$	$\perp Y sc_1$	$\perp Y sc_2$	$\parallel 2$						

Tabelul A.2 (continuare)

clasa	Z [001]	X [100]	Y [010]	α, β, γ	X_3	X_1	X_2	Alegerea sistemului de coordonate	Modificarea dextrogiră
222	$\parallel 2 \text{ sc}_1$	$\parallel 2 \text{ sc}_2$	$\parallel 2 \text{ sc}_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	[001]	[100]	[010]		$d_{36} > 0$
mm2	$\parallel 2$	$\perp m \text{ sc}_1$	$\perp m \text{ sc}_2$					$d_{33} > 0$	
mmm	$\parallel 2 \text{ sc}_1$	$\parallel 2 \text{ sc}_2$	$\parallel 2 \text{ sc}_3$						

Singonia rombică

4	$\parallel 4$	$\perp Z \text{ sc}$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	[001]	[100]	[010]	$s_{16} > 0$	$d_{33} > 0$
$\bar{4}$	$\parallel \bar{4}$	$\perp Z \text{ sc}$					$s_{16} > 0, d_{36} > 0$	
4/m	$\parallel 4$	$\perp Z \text{ sc}$					$s_{16} > 0$	
422	$\parallel 4$	$\perp Z \text{ sc}$						$d_{14} > 0$
4mm	$\parallel 4$	$\perp Z \text{ sc}$					$d_{33} > 0$	
$\bar{4}2m$	$\parallel \bar{4}$	$\parallel 2$					$d_{36} > 0$	
4/mmm	$\parallel 4$	$\perp Z \text{ sc}$						

Singonia hexagonală

3	$\parallel 3$	$\perp Z \text{ sc}$	$\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$	[0001]	$[2\bar{1}10]$	$[01\bar{1}0]$	$s_{14} > 0, s_{25} > 0$	$d_{33} > 0$
$\bar{3}$	$\parallel \bar{3}$	$\perp Z \text{ sc}$					$s_{14} > 0, s_{25} > 0$	
32	$\parallel 3$	$\parallel 2$					$s_{14} > 0$	$d_{11} > 0$
3m	$\parallel 3$	$\perp m$					$s_{14} > 0, d_{33} > 0$	
$\bar{3}m$	$\parallel \bar{3}$	$\parallel 2$					$s_{14} > 0$	
6	$\parallel 6$	$\perp Z \text{ sc}$						$d_{33} > 0$
$\bar{6}$	$\parallel \bar{6}$	$\perp Z \text{ sc}$					$\pi_{16} > 0, d_{11} > 0$	
6/m	$\parallel 6$	$\perp Z \text{ sc}$					$\pi_{16} > 0$	
622	$\parallel 6$	$\perp Z \text{ sc}$						$d_{14} > 0$
6mmm	$\parallel 6$	$\perp Z \text{ sc}$					$d_{33} > 0$	
$\bar{6}m2$	$\parallel \bar{6}$	$\perp m$					$d_{22} > 0$	
6/mmm	$\parallel 6$	$\perp Z \text{ sc}$						

Tabelul A.2 (continuare)

Clasa	Z [001]	X [100]	Y [010]	α, β, γ	X_2	X_1	X_3	Alegerea sistemului de coordonate	Modificarea dextrogiră
<i>Singonia cubică</i>									
23	$\parallel 2$							$\pi_{12} > \pi_{13}$	$d_{14} > 0$
m3	$\parallel 2$							$\pi_{12} > \pi_{13}$	
432	$\parallel 4$			$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	[001]	[100]	[010]		$G > 0$
$\bar{4}3m$	$\parallel \bar{4}$							$d_{14} > 0$	
m3m	$\parallel 4$								
<i>Modificări posibile</i>									
2	$\parallel 2$	$\perp Z sc_1$	$\perp Z sc_2$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$					$d_{33} > 0$
m	$\perp m$	$\perp Z sc_1$	$\perp Z sc_2$	$\gamma > 90^\circ$	[001]	[100]	$\perp (010)$	$d_{11} > 0$	
2/m	$\parallel 2$	$\perp Y sc_1$	$\perp Z sc_2$						
$\bar{6}2m$	$\parallel \bar{6}$	$\parallel 2$		$\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$	[0001]	$[2\bar{1}10]$	$[01\bar{1}0]$	$d_{11} > 0$	

În secțiunea (din tabel) „Modificări posibile” este indicat modul în care se modifică regulile de alegere a axelor de coordonate și a modificărilor enantiomorfe, dacă se ia o altă amplasare pentru cristalele din singonia monoclinică și clasa $\bar{6}m2$, care, în noua amplasare, este firesc să fie notată cu $\bar{6}2m$.

B. REȚELELE BRAVAIS ȘI MATRICELE CRISTALOGRAFICE

Subîmpărțirea rețelelor Bravais în rețele primitive și rețele centrate este, într-o anumită măsură, convențională. Aici se vor considera primitive acele șase rețele pe ai căror vectori ai bazei se construiesc, de regulă, sistemele de coordonate cristalografice.

Parametrii acestor rețele și matricele lor cristalografice se determină cu ajutorul regulilor de alegere a sistemelor cristalografice de coordonate (v. anexa A). Celelalte opt rețele Bravais se consideră centrate; în particular, rețeaua rombică se consideră ca o rețea hexagonală centrată.

Notățiile:

a, b, c — lungimile vectorilor bazei rețelei cristaline;

α, β, γ — unghiurile dintre ele;

$v = abc\omega$ — volumul celulei elementare;

a^*, b^*, c^* — lungimile vectorilor bazei rețelei reciproce;

$\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ — unghiurile dintre ele;

ω — vezi mai jos;

$A = \|A_{\alpha i}\|$ — matricea dezvoltării bazei vectoriale a_α a rețelei cristaline după versorii e_i ai sistemului de coordonate cristalofizic (indicii notați cu litere grecești indexează șirurile, cei notați cu litere latine, coloanele);

$E = \|E_i^\alpha\|$ — matricea dezvoltării versorilor e_i ai sistemului de coordonate cristalofizic după vectorii bazei, a_α , ai rețelei cristaline (literele latine indexează șirurile, literele grecești, coloanele);

$G = \|g_{\alpha\beta}\|$ — matricea componentelor covariante ale tensorului metric;

$G^{-1} = \|g^{\alpha\beta}\|$ — matricea componentelor contravariante ale tensorului metric;

$Q = \|Q_\alpha^{\beta'}\|$ — matricea dezvoltării bazei vectoriale a rețelei cristaline centrate după vectorul fundamental corespunzător rețelei primitive (indicii fără accent se referă la rețeaua centrată și indică șirurile, cei cu accent se referă la rețeaua primitivă și indică coloanele);

$P = \|P_\alpha^{\beta'}\|$ — matricea dezvoltării vectorului bazei rețelei cristaline primitive, în raport cu vectorul bazei rețelei centrate (indicii cu accent se referă la rețeaua primitivă și indică șirurile, cei fără accent se referă la rețeaua necentrată și indică coloanele);

Cîteva formule. Vom prezenta cele mai importante relații dintre parametrii rețelelor primitive Bravais, care facilitează utilizarea tabelului B.1.

Rețeaua triclinică primitivă, $P\bar{1}$

$$\omega = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma},$$

$$a^* = \frac{\sin \alpha}{a \omega}, \quad b^* = \frac{\sin \beta}{b \omega}, \quad c^* = \frac{\sin \gamma}{c \omega},$$

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, \quad \cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha},$$

Matricele A, E, G și G^{-1} pentru rețelele Bravais primitive

Rețeaua	A	E	G	G^{-1}
triclinică $P\bar{1}$	$\begin{pmatrix} a \sin \beta & 0 & a \cos \beta \\ -b \sin \alpha \cos \gamma & \frac{b \omega}{\sin \beta} & b \cos \alpha \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{a^* \omega}{\sin \alpha \sin \beta} & 0 & -\frac{c^* \omega}{\operatorname{tg} \beta \sin \gamma} \\ a^* \cos \gamma & b^* & c^* \cos \alpha \\ 0 & 0 & \frac{c^* \omega}{\sin \gamma} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ca \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^{*2} a^* b^* \cos \gamma & c^* a^* \cos b^* \\ a^* b^* \cos \gamma & b^{*2} b^* c^* \cos \alpha \\ c^* a^* \cos \beta & b^* c^* \cos \alpha & c^{*2} \end{pmatrix}$
monoclinică $P2/m$	$\begin{pmatrix} a \sin \beta & 0 & a \cos \beta \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^* & 0 & -c^* \cos \beta \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \sin \beta \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & 0 & ca \cos \beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ca \cos \beta & 0 & c^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & c^* a^* \cos \beta \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ c^* a^* \cos \beta & 0 & c^{*2} \end{pmatrix}$
rombică Pmm	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{pmatrix}$
tetragonală $P4/mmm$	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & a^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{pmatrix}$
hexagonală $P6/mmm$	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ a & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{a}{2} & 0 & c \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{a^* \sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{a^*}{2} & a^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ \frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{a^{*2}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{a^{*2}}{2} & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{pmatrix}$
cubică $Pm\bar{3}m$	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & a^* & 0 \\ 0 & 0 & a^* \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & a^{*2} \end{pmatrix}$

Matricele G și G^{-1} pentru rețelele Bravais centrate

Rețeaua	G		G^{-1}
$C2/m$	a^2	$a^2 \cos \gamma$	a^2
	$a^2 \cos \gamma$	$ac \cos \alpha$	$a^2 \cos \gamma^*$
	$ac \cos \alpha$	c^2	$a^*c^* \cos \alpha^*$
$Cmmm$	a^2	$a^2 \cos \gamma$	a^2
	$a^2 \cos \gamma$	0	$a^*2 \cos \gamma^*$
	0	c^2	0
$Fmmm$	a^2	$\frac{a^2 + b^2 + c^2}{2}$	$a^*2 \cos \gamma^*$
	$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{2}$	$\frac{a^2 - b^2 + c^2}{2}$	$a^*2 \cos \beta^*$
	$\frac{a^2 - b^2 + c^2}{2}$	$\frac{-a^2 + b^2 + c^2}{2}$	$a^*2 \cos \alpha^*$
$Immm$	a^2	$a^2 \cos \gamma$	a^*2
	$a^2 \cos \gamma$	$a^2 \cos \alpha$	$a^*2 \cos \gamma^*$
	$a^2 \cos \beta$	$a^2 \cos \alpha$	$a^*2 \cos \beta^*$

Tabelul B.2 (continuare)

Rețeaua	G		G-1	
$I4/mmm$	a^2	$-a^2(1+2\cos\alpha)$	$a^2 \cos \alpha$	$\frac{2a^{*2} - c^{*2}}{2}$
	$-a^2(1+2\cos\alpha)$	a^2	$a^2 \cos \alpha$	$\frac{c^{*2}}{2}$
	$a^2 \cos \alpha$	$a^2 \cos \alpha$	a^2	$\frac{c^{*2}}{2}$
$R\bar{3}m$	a^2	$a^2 \cos \alpha$	$a^2 \cos \alpha$	$a^{*2} \cos \alpha^*$
	$a^2 \cos \alpha$	a^2	$a^2 \cos \alpha$	$a^{*2} \cos \alpha^*$
	$a^2 \cos \alpha$	$a^2 \cos \alpha$	a^2	a^{*2}
$Fm\bar{3}m$	a^2	$\frac{a^2}{2}$	$\frac{a^2}{2}$	$-\frac{a^{*2}}{3}$
	$\frac{a^2}{2}$	a^2	$\frac{a^2}{2}$	$-\frac{a^{*2}}{3}$
	$\frac{a^2}{2}$	$\frac{a^2}{2}$	a^2	a^{*2}
$Im\bar{3}m$	a^2	$-\frac{a^2}{3}$	$\frac{a^2}{3}$	$\frac{a^{*2}}{2}$
	$-\frac{a^2}{3}$	a^2	$\frac{a^2}{3}$	$\frac{a^{*2}}{2}$
	$-\frac{a^2}{3}$	$-\frac{a^2}{3}$	a^2	$\frac{a^{*2}}{2}$

Matricele Q și P , care leagă vectorii fundamentali al rețelelor Bravais centrate, de bazele rețelelor primitive corespunzătoare

Rețelele	$C2/m$ $Cmmm$	$Fmmm$ $Fm3m$	$Immm$ $I4/mmm$ $Im3m$	$R\bar{3}m$
Q	$\begin{matrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{matrix}$
P	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{matrix}$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}$$

Rețeaua monoclinică primitivă, $P2/m$,

$$\alpha = \gamma = 90^\circ, \omega = \sin \beta,$$

$$a^* = 1/a \sin \beta, b^* = 1/b, c^* = 1/c \sin \beta, \alpha^* = \gamma^* = 90^\circ, \beta^* = 180^\circ - \beta.$$

Rețeaua rombică primitivă, $Pmmm$,

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ, \omega = 1,$$

$$a^* = 1/a, b^* = 1/b, c^* = 1/c, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ.$$

Rețeaua tetragonală primitivă, $P4/mmm$

$$a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ, \omega = 1, a^* = b^* = 1/a, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ.$$

Rețeaua hexagonală primitivă, $P6/mmm$,

$$a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ, \omega = \sqrt{3}/2,$$

$$a^* = b^* = 2/(a\sqrt{3}), c^* = 1/c, \alpha^* = \beta^* = 90^\circ, \gamma^* = 60^\circ.$$

Rețeaua cubică primitivă,

$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ, \omega = 1,$$

$$a^* = b^* = c^* = 1/a, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ.$$

După caracterul poziției lor față de elementele de simetrie ale cristalului, direcțiile dintr-un cristal se împart în direcții speciale și direcții nespeciale, polare și nepolare, axiale și neaxiale, elicoidale și neelicoidale (v. și Jeludev, 1971). Am utilizat aici termenul tradițional de „direcție”, însă mai exact, în contextul dat, este vorba despre drepte.

O dreaptă se numește *nespecială* dacă toate operațiile de simetrie ale unui grup punctual al unui cristal o transformă în ea însăși.

Să asociem dreptei date un vector polar. Dacă cel puțin una dintre operațiile de simetrie ale grupului punctual al cristalului transformă această dreaptă în ea însăși, iar vectorul într-un vector opus, dreapta se numește dreaptă *nepolară*.

Să asociem dreptei un vector axial. Dacă cel puțin una dintre operațiile de simetrie ale grupului punctual transformă dreapta în ea însăși, iar vectorul axial într-un vector opus, dreapta se numește dreaptă *neaxială*.

Să legăm, în fine, de dreaptă, o elice. Dacă cel puțin una dintre operațiile grupului punctual de simetrie a cristalului transformă această dreaptă în ea însăși, iar șurubul într-un șurub de nume contrar, dreapta se numește dreaptă *neelicoidală*.

Definițiile corespunzătoare pot fi introduse și în alt mod, folosind grupurile limită Curie. Grupul de simetrie al unei drepte izolate este $G_{dr} = \infty/mm$, astfel încât axa ∞ coincide cu dreapta; însă grupul de simetrie al unei drepte dintr-un cristal, $G_{dr,cr}$, pe care îl vom numi pur și simplu grupul de simetrie al dreptei, reprezintă intersecția grupului punctual al cristalului, G_{cr} cu grupul G_{dr}

$$G_{dr,cr} = G_{cr} \cap G_{dr}$$

O dreaptă se numește dreaptă *specială*, dacă grupul său de simetrie coincide cu grupul de simetrie al cristalului

$$G_{dr,cr} = G_{cr}$$

evident, pentru aceasta este necesar și suficient ca grupul de simetrie al cristalului să fie un subgrup al dreptei izolate (desigur, ținând cont de poziția lor reciprocă)

$$G_{cr} \subset G_{dr} = \infty/mm.$$

Direcțiile din cristale

Clasa	nepolare	neaxiale	neelicoidale	Speciale			
				polare	axiale	elicoidale	alte direcții
1	—	—	—	hkl	hkl	hkl	—
$\bar{1}$	hkl	—	hkl	—	hkl	—	—
2	$h0l$	$h0l$	—	010	010	010 $h0l$	—
m	010	$h0l$	010 $h0l$	$h0l$	010	—	—
$2/m$	hkl	$h0l$	hkl	—	010	—	$h0l$
222	010 $h0l$ $hk0$	010 $h0l$ $hk0$	—	—	—	100 010 001	—
$mm2$	$hk0$	010 $h0l$ $hk0$	010 $h0l$	001	—	—	100 010
mmm	hkl	010 $h0l$ $hk0$	hkl	—	—	—	100 010 001
3	—	—	—	0001	0001	0001	—
$\bar{3}$	$hkil$	—	$hkil$	—	0001	—	—
32	0101	0101	—	—	—	0001	—
3m	2110	0101	2110 0101	0001	—	—	—
$\bar{3}m$	$hkil$	0101	$hkil$	—	—	—	0001
4	$hk0$	$hk0$	—	001	001	001	—
$\bar{4}$	$hk0$ 001	$hk0$	001	—	001	—	—
$4/m$	hkl	$hk0$	hkl	—	001	—	—
422	$hk0$ 010 hhl	$hk0$ 010 hhl	—	—	—	001	—

Tabelul C.1 (continuare)

Clasa	nepolare	neaxiale	neelicoidale	Speciale			
				polare	axiale	elicoidale	alte direcții
4mm	hk0	hk0 Ok1 hhl	Ok1 hhl	001	—	—	—
$\bar{4}2m$	hk0 Ok1	hk0 Ok1 hhl	hhl	—	—	—	001
4/mmm	hkl	hk0 Ok1 hhl	hkl	—	—	—	001
6	hki0	hki0	—	0001	0001	0001	—
$\bar{6}$	hki0 0001	hki0	hki0 0001	—	0001	—	—
6/m	hkil	hki0	hkil	—	0001	—	—
622	hki0 Okkl hkkl	hki0 Okkl hkkl	—	—	—	0001	—
6mm	hki0	hki0 Okkl hkkl	Okkl hkkl	0001	—	—	—
$\bar{6}m2$	hki0 hkkl	hki0 Okkl hkkl	hki0 Okkl	—	—	—	0001
6/mmm	kkil	hki0 Okkl hkkl	hkil	—	—	—	0001
23	Ok1	Ok1	—	—	—	—	—
m3	hkl	Ok1	hkl	—	—	—	—
432	Ok1 hhl	Ok1 hhl	—	—	—	—	—
$\bar{4}3m$	Ok1	Ok1 hhl	hhl	—	—	—	—
m3m	hkl	Ok1 hhl	hkl	—	—	—	—

Direcțiile din medii de simetrie limită

Grupul Curie	Nepolare	Neaxiale	Neelcoidale	Speciale			
				polare	axiale	eliceoidale	alte direcții
∞	$\perp k$	$\perp k$	nu au	k	k	k	nu au
∞/m	toate	$\perp k$	toate	nu au	k	nu au	nu au
$\infty 2$	toate	toate	nu au	nu au	nu au	k	nu au
∞m	$\perp k$	toate	toate	k	nu au	nu au	nu au
∞/mm	toate	toate	toate	nu au	nu au	nu au	k
$\infty\infty$	toate	toate	nu au	nu au	nu au	nu au	nu au
$\infty\infty m$	toate	toate	toate	nu au	nu au	nu au	nu au

Observație. Vectorul k este orientat după axa principală de simetrie.

De aici rezultă direct că drepte speciale există în acele și numai în acele cristale ale căror grupuri punctuale sînt subgrupuri limită ∞/mm ; asemenea cristale sînt cristalele din categoria inferioară și din cea medie.

O dreaptă se numește dreaptă *polară*, dacă grupul ei de simetrie este subgrup al grupului polar

$$G_{dr,cr} \subset \infty m.$$

Ea se numește *axială*, dacă grupul său de simetrie este un subgrup al vectorului axial

$$G_{dr,cr} \subset \infty/m.$$

În fine, ea se numește dreaptă *eliceoidală*, dacă grupul ei de simetrie este un subgrup al grupului elicei

$$G_{dr,cr} \subset \infty 2.$$

Caracteristicile enumerate ale direcțiilor (revenim la denumirea tradițională) sînt importante pentru fizica cristalelor. Astfel, un vector propriu izolat (adică un vector care nu este cuprins nici în planul, nici în spațiul vectorilor proprii) al unui tensor simetrie de material de rangul doi coincide totdeauna cu una dintre direcțiile speciale ale cristalului. Pot fi cristale piroelectrice numai acele cristale care au cel puțin o singură direcție polară specială; numai această direcție poate servi drept direcție a vectorilor polarizării spontane, inducției electrice spontane și coeficienților piroelectrici. Direcție de polarizare piroelectrică poate

fi numai o direcție polară. În fine, dubla refracție circulară sau eliptică de tip elicoidal poate fi numai în direcții elicoidale (posibilitatea dublei refracții de tip axial este determinată de simetria magnetică a unei direcții; v. § 82).

Direcțiile polară, axială și elicoidală sînt date în figura 44.1. Caracteristicile tuturor fasciculelor posibile de direcții simetric echivalente, pentru toate cele 32 de clase de simetrie ale cristalelor sînt date în tabelul C.1. Fasciculele de direcții simetric echivalente din cristalele singoniei hexagonale (sistemele trigonal și hexagonal) se caracterizează prin indici Bravais, iar în cristalele celorlalte clase, prin indici Miller. Aranjarea este cea standard (v. anexa A). În tabelul C.2 sînt date proprietățile direcțiilor din mediile cu simetrie limită.

D. DEMONSTRAȚIA ANALITICĂ A TEOREMELOR ÎNMULȚIRII OPERAȚIILOR DE SIMETRIE

Teoremele înmulțirii operațiilor de simetrie, date în § 3, sînt ușor de demonstrat analitic, aplicînd înmulțirea matricelor corespunzătoare; metoda de construire a acestor matrice este dată în § 17, ele însele fiind descrise în tabelul 17.1.

Demonstrația teoremei 1. Fără a restrînge generalitatea, se poate considera că unul dintre planurile care se intersectează este normal la vectorul bazei, e_1 , iar vectorul unitar al normalei celui de al doilea este egal cu $e_1 \cos \psi + e_2 \sin \psi$ (ψ fiind unghiul dintre planuri). Să le transcriem din tabel și să înmulțim matricele corespunzătoare

$$\begin{vmatrix} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Rezultatul: matricea este rotită în jurul vectorului e_3 (adică a liniei de intersecție a planurilor) cu dublul unghiului dintre planuri).

Demonstrația teoremei 2. Înmulțind matricea rotației în jurul axei 2 cu reflexia într-un plan perpendicular la ea (2_z și m_z)

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix},$$

obținem matricea de inversie. Analog se demonstrează toate celelalte teoreme.

E. TENSORII INVARIANTI FAȚĂ DE GRUPURILE CRISTALOGRAFICE ȘI FAȚĂ DE GRUPURILE LIMITĂ

În tabelele acestei anexe sînt dați tensorii și pseudotensorii de diverse simetrii interne (simetria internă este dată în titlurile tabelelor prin simbolurile lui Jahn — v. § 42), invariante față de toate grupurile cristalografice și de grupurile limită posibile; numai în ultimele trei tabele, pentru a economisi spațiu, sînt dați tensorii de rangul cinci și de rangul șase numai pentru cîteva clase (tabele mai complete — pînă la rangul opt inclusiv — a întocmit Smith, 1970). Pentru toți tensorii este dat numărul de componente independente ale lor și numărul de invarianți independenți (cînd se dă numai numărul de componente, aceasta înseamnă că numărul de invarianți independenți este același). Tensorii (și pseudotensorii), invarianți față de grupurile cristalografice și față de grupurile limită date se utilizează în fizica cristalelor ca tensori de material ai cristalelor și texturilor care se referă la clasele cristalografice și clasele limită respective. Mai jos sînt enumerate aplicațiile în cadrul fizicii cristalelor ale tensorilor dați în această anexă.

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.1	ϵ	Enantiomorfismul ρ : pentru cristale dextrogire, $\rho = 1$, pentru levogire, $\rho = -1$, pentru neenantio-morfe $\rho = 0$ (§ 5); rotația specifică a planului de polari-zare, α , pentru substanțele optic izotrope (§ 81).
E.2	V	Vectorii coeficienților piroelectrici, p (§ 31), pola-rizare spontană, $P^{(0)}$, și inducție spontană, $D^{(0)}$ (§§ 26, 65), polarizare piezoelectrică sub acțiunea presiunii hidrostatice, $d = d : I$ (§ 58).
E.3	ϵV	Vectorii axiali, duali tensorilor $\{V^2\}$ (v. tab. E.5). Se pare că se pot utiliza ca tensori de material indepen-denți. Cu mult înainte s-a presupus că vectorul coefi-cienților piromagnetici este de acest fel, însă după descoperirea simetriei magnetice a cristalelor s-a dove-dit că aceasta este o eroare.
E.4	$[V^2]$	Tensorii deformării spontane, $\epsilon^{(0)}$ (§ 65), suscep-tibilității dielectrice, α , permitivității, χ și impermi-tivității, η (§§ 26, 27), susceptibilității magnetice μ (§ 73), dilatării termice, α , și termoelasticității β (§§ 51, 52) precum și mulți alții; în plus, tensorii conductibi-lității electrice, σ , rezistivității ρ , conductibilității termice, λ , și difuzibilității, k , pentru clasele nemag-netice (§§ 32, 33, 76).

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.5	$\{V^2\}$	Părțile antisimetrice ale tensorilor de tipul V^2 (tab. E.6), ca tensori de material considerați separat se pare că nu se utilizează practic.
E.6	V^2	Tensorii coeficienților Faraday, F (§ 82), coeficienților termoelectrice, α și γ (§ 76), tensorii coeficienților Hall, R , și Leduc-Righi, L , în cristalele nemagnetice (§ 76) și tensorii conductibilității electrice, σ , rezistivității, ρ , și conductibilității termice, λ , în cristalele magnetice.
E.7	$\epsilon[V^2]$	Pseudotensorul simetric al coeficienților de rotație, G (§§ 81, 82).
E.8	$\epsilon\{V^2\}$	Partea antisimetrică din întregul pseudotensor de rotație; reprezintă numai activitatea optică „slabă” (§ 81).
E.9	ϵV^2	Pseudotensorul (nesimetric) întreg al coeficienților de rotație: pe lângă activitatea optică obișnuită („intensă”) descrie și pe cea „slabă” (§ 81).
E.10	$[V^3]$	Tensorul efectului piezoelectric longitudinal, f (§ 58); tensorul susceptibilității dielectrice pătratice, $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ când se neglijează dispersia (§§ 79, 80).
E.11	$V[V^2]$	Tensorii coeficienților piezoelectrice d și e (§§ 58, 60, 61), coeficienților efectului electrooptic, r (§ 77), coeficienților susceptibilității pătratice, $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ și $\chi(0, \omega, \omega)$ (§ 79).
E.12	$\{V^2\}V$	Tensorul de material γ , care caracterizează dispersia spațială de ordinul întâi (§ 81).
E.13	V^3	Tensorul susceptibilității pătratice, $\chi(\omega_1 \pm \omega_2, \omega_1, \omega_2)$ pentru $\omega_1 \neq \omega_2$ și ținând cont de dispersie (§ 79).
E.14	$\epsilon V[V^2]$	Pseudotensorul de electro rotație, A , care definește variația pseudotensorului simetric al rotației, sub acțiunea câmpului electric (§ 82). Înainte, se considera, în mod eronat, că tot așa sînt și coeficienții piezomagnetici (de comparat cu aplicațiile în fizica cristalelor ale vectorului axial — E.3).
E.15	ϵV^3	Pseudotensorul coeficienților Nernst și Ettingshausen, N și M (§ 76); pseudotensorii coeficienților Hall, P , și Leduc-Righi, Q , în cristalele magnetice (§ 76).
E.16	$[V^4]$	Tensorul susceptibilității cubice, $\theta(3\omega, \omega, \omega, \omega)$ când se neglijează dispersia (§ 79).

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.17	$V[V^3]$	Tensorul susceptibilității cubice θ ($3\omega, \omega, \omega, \omega$) (§ 79).
E.18	$[[V^2]^2]$	Tensorul coeficienților de elasticitate, e , și de deformabilitate elastică, s (§§ 51, 52).
E.19	$[V^2]^2$	Tensorii coeficienților de electrostricțiune, P (§ 74), de magnetostricțiune, de elastorezistență, m , și de piezorezistență, Π (§75), coeficienților elastooptici, p , piezooptici, π (§ 77); coeficienților Kerr, K (§§ 77, 79) și Cotton-Mouton C (§ 82).
E.20	$[(V^2)^2]$	Tensorii coeficienților elastici în cadrul teoriilor nesimetrice ale elasticității.
E.21	$[V^2]V^2$	Tensorul susceptibilității cubice, θ ($2\omega, 0, \omega, \omega$) descrie generarea armonice de ordinul doi al radiației electromagnetice în cristalele cu centru de simetrie, supuse cimpului electric (§§ 79, 80).
E.22	V^4	Tensorul general al susceptibilității cubice, θ ($\omega, \omega_1, \omega_2, \omega_3$) (§ 79).
E.23	$V[[V^2]^2]$	Tensorul efectului piezoelectric pătratic, Q , tensorul efectului cimpului magnetic asupra constantelor elastice etc. (§ 74).
E.24	$[[V^2]^3]$	Coeficienții pătraticei ai elasticității, C , și ai deformabilității elastice, L (§ 74).
E.25	$[V^2][[V^2]^2]$	Coeficienții efectului tensiunii statice sau a deformării statice asupra constantelor elastice dinamice (§ 74), ai efectului piezooptic pătratic etc.

Tabelul E.1

 ε — pseudosealarul ρ

Clasele	ρ
1, 2, 222, 3, 32, 4, 422, 6, 622, 23, 432, ∞ , $\infty 2$, $\infty\infty$	ρ
$\bar{1}$, m , $2/m$, $mm2$, mmm , $\bar{3}$, $3m$, $\bar{3}m$, $\bar{4}$, $4/m$, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, $\bar{6}$, $6/m$, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $m3$, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m , ∞m , ∞/mm , $\infty\infty m$	0

V — vectorul p

Tabelul E.2

Clasele	p_i	Clasele	p_i
1—3 comp., 1 inv. *	$p_1 p_2 p_3$	$2(2 \parallel X_2) - 1 \text{ comp.}$	$0 p_2 0$
$m(m \perp X_2) - 2 \text{ comp.,}$ 1 inv.	$p_1 0 p_3$	$2(2 \parallel X_3), mm2, 3, 3m,$	
$m(m \perp X_3) - 2 \text{ comp.,}$ 1 inv.	$p_1 p_2 0$	$4, 4mm, 6, 6mm, \infty,$ $\infty m - 1 \text{ comp.}$	$0 0 p_3$

* „3 comp., 1 inv.” înseamnă că tensorul de material din clasa dată are 3 componente independente și 1 invariant independent. Aceste prescurtări se utilizează în toate tabelele din această anexă. Cînd este dat numai numărul de componente independente, înseamnă că numărul de invarianți este același cu numărul de componente.

În clasele $\bar{1}, 2/m, 222, mmm, \bar{3}, 32, \bar{3}m, \bar{4}, 4/m, 422, \bar{4}2m, 4/mmm, \bar{6}, 6/m, 622, \bar{6}m2, 6/mmm, 23, m3, 432, \bar{4}3m, m3m, \infty/m, \infty 2, \infty/mm, \infty\infty, \infty\infty m, p = 0$.

ϵV — vectorul axial \vec{a}

Tabelul E.3

Clasele	a_i
1, $\bar{1}$ —3 comp., 1 inv.	$a_1 a_2 a_3$
2, $m, 2/m (2 \parallel X_2, m \perp X_2) - 1 \text{ comp.}$	$0 a_2 0$
2, $m, 2/m (2 \parallel X_3, m \perp X_3), 3, \bar{3}, 4, \bar{4}, 4/m, 6, \bar{6}, 6/m, \infty, \infty/m - 1 \text{ comp.}$	$0 0 a_3$

În clasele $222, mm2, mmm, 32, 3m, \bar{3}m, 422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm, 622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, 23, m3, 432, \bar{4}3m, m3m, \infty 2, \infty m, \infty/mm, \infty\infty, \infty\infty m, \vec{a} = 0$.

$[V^2]$ — tensorul simetric de rangul doi, S ; $S_{ij} = S_{ji}$

Tabelul E.4

Clasele	S_{ij}	Clasele	S_{ij}
1, $\bar{1}$	$S_{11} S_{12} S_{31}$ $S_{22} S_{23}$ S_{33}	222, $mm2, mmm$ 3 comp.	$S_{11} 0 0$ $S_{22} 0$ S_{33}
6 comp., 3 inv.			
2, $m, 2/m$ ($2 \parallel X_2, m \perp X_2$) 4 comp., 3 inv.	$S_{11} 0 S_{31}$ $S_{22} 0$ S_{33}	3, $\bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m, 4, \bar{4},$ $4/m, 422, 4mm, \bar{4}2m,$ $4/mmm, 6, \bar{6}, 6/m, 622,$ $6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, \infty,$ $\infty/m, \infty 2, \infty m,$ $\infty/mm - 2 \text{ comp.}$	$S_{11} 0 0$ $S_{11} 0$ S_{33}
2, $m, 2/m$ ($2 \parallel X_3, m \perp X_3$) 4 comp., 3 inv.	$S_{11} S_{12} 0$ $S_{22} 0$ S_{33}	23, $m3, 432, \bar{4}3m, m3m,$ $\infty\infty, \infty\infty m, 1 \text{ comp.}$	$S_{11} 0 0$ $S_{11} 0$ S_{11}

Tabelul E.5

[V²] — tensorul antisimetric de rangul doi, A; A_{ji} = A_{ij}

Clasele	A _{ij}	Clasele	A _{ij}
1, $\bar{1}$ 3 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & A_{12} & -A_{31} \\ -A_{12} & 0 & A_{23} \\ A_{31} & -A_{23} & 0 \end{matrix}$	2, m, 2/m (2 X ₃ , m ⊥ X ₃), 3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, 4/m, 6, $\bar{6}$, 6/m ∞, ∞/m 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & A_{12} & 0 \\ -A_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 X ₂ , m ⊥ X ₂) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -A_{31} \\ 0 & 0 & 0 \\ A_{31} & 0 & 0 \end{matrix}$		

În clasele 222, mm2, mmm, 32, 3m, $\bar{3}m$, 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm, 622, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm, 23, m3, 432, $\bar{4}3m$, m3m, ∞2, ∞m, ∞/mm, ∞ ∞ ∞ ∞ m A = 0.

Tabelul E.6

V² — tensorul de rangul doi, T

Clasele	T _{ij}	Clasele	T _{ij}
1, $\bar{1}$ 9 comp., 6 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{matrix}$	3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, 4/m, 6, $\bar{6}$, 6/m, ∞, ∞/m 3 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ -T_{12} & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 X ₂ , m ⊥ X ₂) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & T_{13} \\ 0 & T_{22} & 0 \\ T_{31} & 0 & T_{33} \end{matrix}$	32, 3m, $\bar{3}m$, 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm, 622, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm, ∞2, ∞m; ∞/mm — 2 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 X ₃ , m ⊥ X ₃) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$		
222, mm2, mmm 3 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$	23, m3, 432, $\bar{4}3m$ m3m, ∞∞, ∞∞m 1 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{matrix}$

Tabelul E.7

ε [V²] — pseudotensorul simetric de rangul doi, G; G_{ji} = G_{ij}

Clasa	G _{ij}	Clasa	G _{ij}	Clasa	G _{ij}
1 6 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & G_{31} \\ & G_{22} & G_{23} \\ & & G_{33} \end{matrix}$	m (m ⊥ X ₃) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & G_{31} \\ & 0 & G_{23} \\ & & 0 \end{matrix}$	$\bar{4}2m$ 1 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & -G_{11} & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$
2 (2 X ₂) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & G_{31} \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	222 3 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	3 32, 4 422, 6, 622, ∞, ∞2 2 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{11} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$
2 (2 X ₃) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	mm2, $\bar{4}m2$ (m ⊥ X ₁ , X ₂) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & G_{12} & 0 \\ & 0 & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$	23, 432, ∞∞ 1 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{11} & 0 \\ & & G_{11} \end{matrix}$
m (m ⊥ X ₂) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & G_{12} & 0 \\ & 0 & G_{23} \\ & & 0 \end{matrix}$	4 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ & -G_{11} & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$		

În clasele $\bar{1}$, 2/m, mmm, 3, 3m, $\bar{3}m$, 4/m, 4mm, $\bar{6}$, 6/m, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm, m3, $\bar{4}3m$, m3m, ∞/m, ∞m, ∞/mm, ∞∞m G = 0.

Tabelul E.8

 $\varepsilon[V^3]$ — pseudotensorul antisimetric de rangul doi, B; — $B_{ji} = B_{ij}$

Clasele	B_{ij}	Clasele	B_{ij}
1 3 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & -B_{31} \\ -B_{12} & 0 & B_{23} \\ B_{31} & -B_{23} & 0 \end{matrix}$	$m(m \perp X_3)$ 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -B_{31} \\ 0 & 0 & B_{23} \\ B_{31} & -B_{23} & 0 \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_2$) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -B_{31} \\ 0 & 0 & 0 \\ B_{31} & 0 & 0 \end{matrix}$	2 ($2 \parallel X_3$), $mm\ 2, 3, 3m$ 4, $4mm, 6, 6mm$ $\infty, \infty m$ 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & 0 \\ -B_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$m(m \perp X_2)$ 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & 0 \\ -B_{12} & 0 & B_{23} \\ 0 & -B_{23} & 0 \end{matrix}$		

În clasele 1, $2/m$, 222 , mmm , 3 , 32 , $3m$, 4 , $4/m$, 422 , $42m$, $4/mmm$, 6 , $6/m$, 622 , $6m2$, $6/mmm$, 23 , $m3$, 432 , $43m$, $m3m$, ∞/m , $\infty 2$, ∞/mm , $\infty\infty$, $\infty\infty m$ $B = 0$.

Tabelul E.9

 εV^2 — pseudotensorul de rangul doi, D

Clasele	D_{ij}	Clasele	D_{ij}	Clasele	D_{ij}
1 9 comp., 6 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & D_{31} \\ D_{21} & D_{22} & D_{32} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{matrix}$	222 3 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$	3, 4, 6, ∞ 3 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ -D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_3$) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & D_{13} \\ 0 & D_{22} & 0 \\ D_{31} & 0 & D_{33} \end{matrix}$	$mm2$ 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ D_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	32, 422 622, $\infty 2$ 2 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_3$) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{21} & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$	4 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & -D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	3m, 4mm 6mm, ∞m 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ -D_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ D_{21} & 0 & D_{23} \\ 0 & D_{32} & 0 \end{matrix}$	$42m$ 1 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & =D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	23 432, $\infty\infty$ 1 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{11} \end{matrix}$
m ($m \perp X_3$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & D_{13} \\ 0 & 0 & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & 0 \end{matrix}$				

În clasele 1, $2/m$, mmm , 3 , $3m$, $4/m$, $4/mmm$, 6 , $6/m$, $6m2$, $6/mmm$, $m3$, $43m$, $m3m$, ∞/m , ∞/mm , $\infty\infty$ $mD = 0$

[V³] — tensorul de rangul trei, f, simetrie în raport cu toți indicii

Clasele	f_{ijk}	Clasele	f_{ijk}	Clasele	f_{ijk}
1 10 comp., 7 inv.	$f_{111} f_{122} f_{133} f_{123}$ $f_{211} f_{222} f_{233}$ $f_{311} f_{322} f_{333}$	mm2 3 comp.	0 0 0 0 0 0 0 $f_{311} f_{322} f_{333}$	4, 6, ∞ , 4mm, 6mm, ∞m 2 comp.	0 0 0 0 0 0 0 $f_{311} f_{311} f_{333}$
2 (2 X ₂) 4 comp., 3 inv.	0 0 0 f_{123} $f_{211} f_{222} f_{233}$ 0 0 0	mm2 ($\infty 42m$) 3 comp.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 $f_{311} f_{311} f_{333}$	$\bar{4}$ 2 comp., 1 inv.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 $f_{311} - f_{311} 0$
2 (2 X ₃) 4 comp., 3 inv.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 $f_{311} f_{322} f_{333}$	3 4 comp., 3 inv.	$f_{111} - f_{111} 0 0$ $-f_{222} f_{222} 0$ $f_{311} f_{311} f_{333}$	$\bar{4}m2$ ($m \perp X_1$) 1 comp.	0 0 0 0 0 0 0 $f_{311} - f_{311} 0$
m ($m \perp X_2$) 6 comp., 6 inv.	$f_{111} f_{122} f_{133} 0$ 0 0 0 $f_{311} f_{322} f_{333}$	32, 62m (2 X ₁) 1 comp.	$f_{111} - f_{111} 0 0$ 0 0 0 0 0 0	$\bar{6}$ 2 comp., 1 inv.	$f_{111} - f_{111} 0 0$ $-f_{222} f_{222} 0$ 0 0 0
m ($m \perp X_3$) 6 comp., 5 inv.	$f_{111} f_{122} f_{133} 0$ $f_{211} f_{222} f_{233}$ 0 0 0	3m ($m \perp X_1$) 3 comp.	0 0 0 0 $-f_{222} f_{222} 0$ $f_{311} f_{311} f_{333}$	$\bar{6}m2$ ($m \perp X_1$) 32 (2 X ₂) 1 comp.	0 0 0 0 $-f_{222} f_{222} 0$ 0 0 0
222, $\bar{4}2m$ 23 $\bar{4}3m$ 1 comp.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 0 0 0	3m ($m \perp X_2$) 3 comp.	$f_{111} - f_{111} 0 0$ 0 0 0 $f_{311} f_{311} f_{333}$		

In clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm , 3 , $3\bar{m}$, $4/m$, 422 , $4/mmm$, $6/m$, 622 , $6/mmm$, $m3$, 432 , $m3m$, ∞/m , $\infty 2$, ∞mmm , $\infty \infty$, $\infty \infty m$ $f = 0$.

$V [V^2]$ – tensorul de rangul trei, e ($e_{ilk} = e_{ikl}$), simetrie în raport cu doi indici

Sînt transcriși coeficienții $e_{i\mu}$, legați de componentele e_{ikl} prin regulile de recalculare (v. anexa F)

$$e_{i\mu} = e_{ikl} \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6)$$

În cazurile în care pentru coeficienții $d_{i\mu}$, care sînt legați de componentele tensorului d_{ikl} prin regulile de recalculare

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

tabelele coeficienților au altă formă, fiind și ei transcriși.

Clasele	$e_{i\mu}$ și $d_{i\mu}$	Clasele	$e_{i\mu}$ și $d_{i\mu}$
1 18 comp., 15 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{matrix}$	mm2 ($\subset 42m$) 5 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & e_{14} & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_2$) 8 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & 0 & e_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{34} & 0 & e_{36} \end{matrix}$	3 6 comp., 5 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & e_{15} & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & e_{15} & -e_{14} & -e_{11} \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_3$) 8 comp., 7 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & e_{25} & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$		$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & -d_{14} & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 10 comp., 9 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & e_{35} & 0 \end{matrix}$	32 ($2 \parallel X_1$) 2 comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_3$) 10 comp., 9 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & 0 & 0 & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & 0 & 0 & e_{26} \\ 0 & 0 & 0 & e_{34} & e_{35} & 0 \end{matrix}$		$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
222 3 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$	32 ($2 \parallel X_2$) 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
mm2 5 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{16} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$		$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$

Tabelul E.11 (continuare)

Clasele	e_{ij} și d_{ij}	Clasele	e_{ij} și d_{ij}
$3m$ ($m \perp X_1$) comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & -e_{23} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\overline{4}m2$ ($m \perp X_1$) 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e_{15} & 0 & 0 \\ e_{21} & -e_{31} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$		
$3m$ ($m \perp X_2$) comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & -e_{11} \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\overline{6}$ 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & 0 & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$		$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
4, 6, ∞ comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & -e_{14} & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\overline{6}m2$ ($m \perp X_1$) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
422, 622, $\infty 2$ 1 comp	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$		$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
4mm 6mm, ∞m 3 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\overline{6}2m$ ($2 \parallel X_1$) 1 comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\overline{4}$ 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e_{15} & e_{14} & 0 \\ e_{31} & -e_{31} & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$		$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\overline{4}2m$ ($2 \parallel X_1$) 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$	$\overline{4}3m, 23$ 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} \end{matrix}$

În clasele $\overline{1}$, $2/m$, mmm , 3 , $\overline{3}m$, $4/m$, $4/mmm$, $6/m$, $6/mmm$, $m3$, 432 , $m3m$, ∞/m , ∞/mmm , $\infty\infty$, $\infty\infty m$ acești tensori sînt egali cu zero.

Tabelul E.12

$\{V^3\}$ V — tensorul de rangul trei, γ ($\gamma_{ijk} = \gamma_{ikj}$), antisimetric în raport cu doi indici

Clasele	γ_{ijk}	Clasele	γ_{ijk}	Clasele	γ_{ijk}
1 9 comp., 6 inv.	$\gamma_{231} \ \gamma_{232} \ \gamma_{233}$ $\gamma_{311} \ \gamma_{312} \ \gamma_{313}$ $\gamma_{121} \ \gamma_{122} \ \gamma_{123}$	222 3 comp.,	$\gamma_{231} \ 0 \ 0$ $0 \ \gamma_{312} \ 0$ $0 \ 0 \ \gamma_{123}$	32, 422, 622, $\infty 2$ 2 comp.	$\gamma_{231} \ 0 \ 0$ $0 \ \gamma_{231} \ 0$ $0 \ 0 \ \gamma_{123}$
2 (2 $\parallel X_2$) 5 comp., 4 inv.	$\gamma_{231} \ 0 \ \gamma_{233}$ $0 \ \gamma_{312} \ 0$ $\beta_{121} \ 0 \ \gamma_{122}$	mm2 2 comp.,	$0 \ \gamma_{232} \ 0$ $\gamma_{311} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0$	3m, 4mm, 6mm, ∞m 1 comp.	$0 \ \gamma_{232} \ 0$ $-\gamma_{232} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0$
2 (2 $\parallel X_3$) 5 comp., 4 inv.	$\gamma_{231} \ \gamma_{232} \ 0$ $\gamma_{311} \ \gamma_{312} \ 0$ $0 \ 0 \ \gamma_{123}$	$\bar{4}$ 2 comp., 1 inv.	$\gamma_{231} \ \gamma_{232} \ 0$ $\gamma_{232} \ \gamma_{231} \ 0$ $0 \ 0 \ 0$	23, 432, 1 comp.	$\gamma_{123} \ 0 \ 0$ $0 \ \gamma_{123} \ 0$ $0 \ 0 \ \gamma_{123}$
m (m $\perp X_2$) 4 comp., 3 inv.	$0 \ \gamma_{232} \ 0$ $\gamma_{311} \ 0 \ \gamma_{313}$ $0 \ \gamma_{122} \ 0$	$\bar{4}2m$ 1 comp.	$\gamma_{231} \ 0 \ 0$ $0 \ -\gamma_{231} \ 0$ $0 \ 0 \ 0$		
m (m $\perp X_3$) 4 comp., 3 inv.	$0 \ 0 \ \gamma_{233}$ $0 \ 0 \ \gamma_{313}$ $\gamma_{121} \ \gamma_{122} \ 0$	3, 4, 6, ∞ 3 comp.	$\gamma_{231} \ \gamma_{232} \ 0$ $-\gamma_{232} \ \gamma_{231} \ 0$ $0 \ 0 \ \gamma_{123}$		

În clasele $\bar{1}$, 2/m, mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, 4/m, 4/mmm, $\bar{6}$, 6/m, $\bar{6}m2$, 6/mmm, m3, $\bar{4}3m$, m3m, ∞/m , ∞/mm , $\infty\infty m$ $\gamma = 0$.

Tabelul E.13

V^3 — tensorul de rangul trei β

Clasele	β_{ijk}								
1 27 comp., 24 inv.	β_{111} β_{211} β_{311}	β_{122} β_{222} β_{322}	β_{133} β_{233} β_{333}	β_{123} β_{223} β_{323}	β_{131} β_{231} β_{331}	β_{112} β_{212} β_{312}	β_{132} β_{232} β_{332}	β_{113} β_{213} β_{313}	β_{121} β_{221} β_{321}
2 (2 $\parallel X_2$) 13 comp., 12 inv.	0 β_{211} 0	0 β_{222} 0	0 β_{233} 0	β_{123} 0 β_{323}	0 β_{231} 0	β_{112} 0 β_{312}	β_{132} 0 β_{332}	0 β_{213} 0	β_{121} 0 β_{321}
2 (2 $\parallel X_3$) 13 comp., 12 inv.	0 0 β_{311}	0 0 β_{322}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{132} β_{232} 0	β_{113} β_{213} 0	0 0 β_{321}

Tabelul E. 13 (continuare)

Clasele	β_{ijk}								
m ($m \perp X_2$) 14 comp., 13 inv.	β_{111} 0 β_{311}	β_{122} 0 β_{322}	β_{133} 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 β_{331}	0 β_{212} 0	0 β_{232} 0	β_{112} 0 β_{213}	0 β_{221} 0
m ($m \perp X_3$) 14 comp., 13 inv.	β_{111} β_{211} 0	β_{122} β_{222} 0	β_{133} β_{233} 0	0 0 β_{323}	0 0 β_{331}	β_{112} β_{212} 0	0 0 β_{332}	0 0 β_{313}	β_{121} β_{221} 0
222 6 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{122} 0 0	0 β_{213} 0	0 0 β_{321}
$mm2$ 7 comp.	0 0 β_{311}	0 0 β_{322}	0 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 0	0 0 0	0 β_{232} 0	β_{113} 0 0	0 0 0
3 9 comp., 8 inv.	β_{111} $-\beta_{222}$ β_{311}	$-\beta_{111}$ β_{222} β_{311}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ β_{312}	$-\beta_{231}$ β_{131} 0	β_{223} $-\beta_{123}$ 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ $-\beta_{312}$
32 ($2 \parallel X_1$) 4 comp.	β_{111} 0 0	$-\beta_{111}$ 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 $-\beta_{111}$ β_{312}	$-\beta_{231}$ 0 0	0 $-\beta_{123}$ 0	0 $-\beta_{111}$ $-\beta_{312}$
$3m$ ($m \perp X_1$) 5 comp.	0 $-\beta_{222}$ β_{311}	0 β_{222} β_{311}	0 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 0	$-\beta_{232}$ 0 0	0 β_{131} 0	β_{223} 0 0	$-\beta_{223}$ 0 0
4, 6, ∞ 7 comp.	0 0 β_{311}	0 0 β_{311}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	0 0 β_{312}	$-\beta_{231}$ β_{131} 0	β_{223} $-\beta_{123}$ 0	0 0 $-\beta_{312}$
422, 622, $\infty 2$ 3 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 0 β_{312}	$-\beta_{231}$ 0 0	0 $-\beta_{123}$ 0	0 0 $-\beta_{312}$

Tabelul E.13 (continuare)

Clasele	β_{ijk}								
$4mm, 6mm$ ∞m 4 comp.	0	0	0	0	β_{131}	0	0	β_{223}	0
	0	0	0	β_{223}	0	0	β_{131}	0	0
	β_{311}	β_{311}	β_{333}	0	0	0	0	0	0
$\bar{4}$ 6 comp., 5 inv.	0	0	0	β_{123}	β_{131}	0	β_{231}	$-\beta_{223}$	0
	0	0	0	β_{223}	β_{231}	0	$-\beta_{131}$	β_{123}	0
	β_{311}	$-\beta_{311}$	0	0	0	β_{312}	0	0	β_{312}
$\bar{4}2m$ 3 comp.	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{231}	0	0
	0	0	0	0	β_{231}	0	0	β_{123}	0
	0	0	0	0	0	β_{312}	0	0	β_{312}
$\bar{6}$ 2 comp., 1 inv.	β_{111}	$-\beta_{111}$	0	0	0	$-\beta_{222}$	0	0	$-\beta_{222}$
	$-\beta_{222}$	β_{222}	0	0	0	$-\beta_{111}$	0	0	$-\beta_{111}$
	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\bar{6}m2$ ($m \perp X_1$) 1 comp.	0	0	0	0	0	$-\beta_{222}$	0	0	$-\beta_{222}$
	$-\beta_{222}$	β_{222}	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\bar{6}2m$ ($2 \parallel X_1$) 1 comp.	β_{111}	$-\beta_{111}$	0	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	$-\beta_{111}$	0	0	$-\beta_{111}$
	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23 2 comp.	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{321}	0	0
	0	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{321}	0
	0	0	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{321}
$\bar{4}3m$ 1 comp.	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{123}	0	0
	0	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{123}	0
	0	0	0	0	0	β_{123}	0	0	β_{123}
432, $\infty\infty$ 1 comp.	0	0	0	β_{123}	0	0	$-\beta_{123}$	0	0
	0	0	0	0	β_{123}	0	0	$-\beta_{123}$	0
	0	0	0	0	0	β_{123}	0	0	$-\beta_{123}$

In clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $4/m$, $4/mmm$, $6/m$, $6/mmm$, $m\bar{3}$, $m\bar{3}m$, ∞/m , ∞/mmm , $\infty\infty m$ $\beta = 0$.

Tabelul E. 14

$\epsilon V[V^2]$ — pseudotensorul de rangul doi, A ($A_{ikl} = A_{ilk}$), simetrie în raport cu doi indici
Sint dați coeficienții $A_{i\mu}$, legați de componentele A_{ikl} prin regulile de recalculare

$$A_{i\mu} = A_{ikl} \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6)$$

Clasele	$A_{i\mu}$	Clasele	$A_{i\mu}$
1, $\bar{1}$ 18 comp., 15 inv.	$A_{11} A_{12} A_{13} A_{14} A_{15} A_{16}$ $A_{21} A_{22} A_{23} A_{24} A_{25} A_{26}$ $A_{31} A_{32} A_{33} A_{34} A_{35} A_{36}$	32, $3m$, $\bar{3}m$ ($2 \parallel X_1$, $m \perp X_1$) 2 comp.	$A_{11} - A_{11} \ 0 \ A_{14} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ -A_{14} \ -A_{11}$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0$
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 8 comp., 7 inv.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ 0 \ A_{16}$ $A_{21} \ A_{22} \ A_{23} \ 0 \ A_{25} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ A_{34} \ 0 \ A_{16}$	4, $\bar{4}$, $4/m$ 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞ , ∞/m , 4 comp.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{15} \ -A_{14} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ A_{15} \ -A_{14} \ 0$ $A_{31} \ A_{31} \ A_{33} \ 0 \ 0 \ 0$
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 8 comp., 7 inv.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ A_{15} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ A_{24} \ A_{25} \ 0$ $A_{31} \ A_{32} \ A_{33} \ 0 \ 0 \ A_{36}$	422, $4mm$ $\bar{4}2m$ $4/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m , ∞/mm 1 comp.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ -A_{14} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0$
222, $mm2$, mmm 3 comp.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ A_{25} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ A_{36}$		
3, $\bar{3}$ 6 comp., 5 inv.	$A_{11} - A_{11} \ 0 \ A_{14} \ A_{15} - A_{22}$ $-A_{22} \ A_{22} \ 0 \ A_{15} \ -A_{14} \ -A_{11}$ $A_{31} \ A_{31} \ A_{33} \ 0 \ 0 \ 0$	23, $m3$ 1 comp.	$0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ A_{14} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ A_{14}$

În clasele 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, $\infty\infty$, $\infty\infty m$ $A = 0$.

Tabelul E. 15

$\epsilon\{V^2\}V$ — pseudotensorul de rangul trei, ψ ($\psi_{ijk} = -\psi_{jik}$), antisimetrie în raport cu doi indici

Clasele	ψ_{ijk}	Clasele	ψ_{ijk}
1, $\bar{1}$ 9 comp., 6 inv.	$\psi_{231} \ \psi_{232} \ \psi_{233}$ $\psi_{311} \ \psi_{312} \ \psi_{313}$ $\psi_{121} \ \psi_{122} \ \psi_{123}$	2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 5 comp., 4 inv.	$\psi_{231} \ 0 \ \psi_{233}$ $0 \ \psi_{312} \ 0$ $\psi_{121} \ 0 \ \psi_{123}$

Tabelul E. 15 (continuare)

Clasele	ψ_{ijk}	Clasele	ψ_{ijk}
2, m, 2/m (2 \parallel X_2 , m \perp X_3) 5 comp., 4 inv.	ψ_{231} ψ_{232} 0 ψ_{311} ψ_{312} 0 0 0 ψ_{123}	32, 3m, $\bar{3}m$, 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm, 622, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm, $\infty 2$, ∞m , ∞/m 2 comp.	ψ_{231} 0 0 0 ψ_{231} 0 0 0 ψ_{123}
222, mm2, mmm 3 comp.	ψ_{231} 0 0 0 ψ_{312} 0 0 0 ψ_{123}		
3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, 4/m, 6, $\bar{6}$, 6/m ∞ , ∞/m 3 comp.	ψ_{231} ψ_{232} 0 $-\psi_{232}$ ψ_{231} 0 0 0 ψ_{123}	23, m3, 432, $\bar{4}3m$, m3m, $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 1 comp.	ψ_{123} 0 0 0 ψ_{123} 0 0 0 ψ_{123}

Tabelul E.16

[V⁴] — tensorul de rangul patru, 1, simetric în raport cu toți indicii

Clasele	l_{ijklmn}	Clasele	l_{ijklmn}
1, $\bar{1}$ 15 comp., 12 inv.	l_{1111} l_{1222} l_{1333} l_{2233} l_{1123} l_{2111} l_{2222} l_{2333} l_{3311} l_{2213} l_{3111} l_{3222} l_{3333} l_{1122} l_{3312}	4, $\bar{4}$, 4/m 5 comp., 4 inv.	l_{1111} $-\bar{l}_{2111}$ 0 l_{2233} 0 l_{2111} l_{1111} 0 l_{2233} 0 0 0 l_{3333} l_{1122} 0
2, m, 2/m (2 \parallel X_2 , m \perp X_3) 9 comp., 8 inv.	l_{1111} 0 l_{1333} l_{2233} 0 0 l_{2222} 0 l_{3311} l_{2213} l_{3111} 0 l_{3333} l_{1122} 0	422, 4mm, $\bar{4}2m$ 4/mmm 4 comp.	l_{1111} 0 0 l_{2233} 0 0 l_{1111} 0 l_{2233} 0 0 0 l_{3333} l_{1122} 0
2, m, 2/m (2 \parallel X_3 , m \perp X_2) 9 comp., 8 inv.	l_{1111} l_{1222} 0 l_{2233} 0 l_{2111} l_{2222} 0 l_{3311} 0 0 0 l_{3333} l_{1122} l_{3312}	6, $\bar{6}$, 6/m, 622, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm ∞ , ∞/m , $\infty 2$, ∞m , ∞/m 3 comp.	$3l_{1122}$ 0 0 l_{2233} 0 0 $3l_{1122}$ 0 l_{2233} 0 0 0 l_{3333} l_{1122} 0
222, mm2 mmm 6 comp.	l_{1111} 0 0 l_{2233} 0 0 l_{2222} 0 l_{3311} 0 0 0 l_{3333} l_{1122} 0	23, m3, 432, $\bar{4}3m$, m3m 2 comp.	l_{1111} 0 0 l_{2233} 0 0 l_{1111} 0 l_{2233} 0 0 0 l_{1111} l_{2233} 0
3, $\bar{3}$ 5 comp., 4 inv.	$3l_{1122}$ 0 0 l_{2233} l_{1123} 0 $3l_{1122}$ 0 l_{2233} $-\bar{l}_{3111}$ l_{3111} $-\bar{l}_{1123}$ l_{3333} l_{1122} 0	$\infty\infty$, $\infty\infty m$ 1 comp.	$3l_{2233}$ 0 0 l_{2233} 0 0 $3l_{2233}$ 0 l_{2233} 0 0 0 $3l_{2233}$ l_{2233} 0
32, 3m, $\bar{3}m$ 4 comp.	$3l_{1122}$ 0 0 l_{2233} l_{1123} 0 $3l_{1122}$ 0 l_{2233} 0 0 $-\bar{l}_{1123}$ l_{3333} l_{1122} 0		

$V [V^3]$ — tensorul de rangul patru, k , simetrie în raport cu ultimii trei indici

Clasele	k_{ijkl}									
1, $\bar{1}$ 30 comp., 27 inv.	k_{1111} k_{2111} k_{3111}	k_{1222} k_{2222} k_{3222}	k_{1333} k_{2333} k_{3333}	k_{1122} k_{2122} k_{3122}	k_{1233} k_{2233} k_{3233}	k_{1311} k_{2311} k_{3311}	k_{1133} k_{2133} k_{3133}	k_{1211} k_{2211} k_{3211}	k_{1322} k_{2322} k_{3322}	k_{1123} k_{2123} k_{3123}
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 16 comp., 15 inv.	k_{1111} 0 k_{3111}	0 k_{2222} 0	k_{1333} 0 k_{3333}	k_{1122} 0 k_{3122}	0 k_{2233} 0	k_{1311} 0 k_{3311}	k_{1133} 0 k_{3133}	0 k_{2211} 0	k_{1322} 0 k_{3322}	0 k_{2123} 0
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 16 comp., 15 inv.	k_{1111} k_{2111} 0	k_{1222} k_{2222} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} k_{2122} 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{1133} k_{2133} 0	k_{1211} k_{2211} 0	0 0 k_{3322}	0 0 k_{3123}
222, $mm2$, mmm 9 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{2222} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{1133} 0 0	0 k_{2211} 0	0 0 k_{3322}	0 0 0
3, $\bar{3}$ 10 comp., 9 inv.	$3k_{1122}$ $-3k_{1211}$ k_{3111}	$3k_{1211}$ $3k_{1122}$ $-k_{3211}$	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ $-k_{3111}$	k_{1233} k_{2233} 0	k_{1311} k_{2311} k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} k_{3211}	$-k_{1311}$ $-k_{2311}$ k_{3311}	k_{2311} $-k_{1311}$ k_{3123}
32, $3m$, $\bar{3}m$ 6 comp.	$3k_{1122}$ 0 0	0 $3k_{1122}$ $-k_{3211}$	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 k_{2311} k_{3311}	k_{2233} 0 0	0 k_{1122} k_{3211}	0 $-k_{2311}$ k_{3311}	k_{2311} 0 0
4, $\bar{4}$, $4/m$ 8 comp., 7 inv.	k_{1111} k_{2111} 0	$-k_{2111}$ k_{1111} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 k_{3123}
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4mm$ 5 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{1111} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} 0 0	0 k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 0
6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞ , ∞/m 6 comp.	$3k_{1122}$ $-3k_{1211}$ 0	$3k_{1211}$ $3k_{1122}$ 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 k_{3123}

Tabelul E. 17 (continuare)

Clasele	k_{ijmn}									
622, $\bar{6}mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m , ∞/mm 4 comp.	$3k_{1122}$	0	0	k_{1122}	0	0	k_{2233}	0	0	0
	0	$3k_{1122}$	0	0	k_{2233}	0	0	k_{1122}	0	0
	0	0	k_{3333}	0	0	k_{3311}	0	0	k_{3311}	0
23, $m\bar{3}$ 3 comp.	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{3322}	0	0	0
	0	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{3322}	0	0
	0	0	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{3322}	0
432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ 2 comp.	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0	0	0
	0	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0	0
	0	0	k_{1111}	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0
$\infty\infty$, $\infty\infty m$ 1 comp.	$3k_{2233}$	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0	0	0
	0	$3k_{2233}$	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0	0
	0	0	$3k_{2233}$	0	0	k_{2233}	0	0	k_{2233}	0

Tabelul E. 18

$[[V^2]^2]$ — tensorul de rangul patru, e, simetrie în raport cu cele două perechi de indici și cu permutarea lor: $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}$

Sint dați coeficienții $c_{\lambda\mu}$, legați de componentele c_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$c_{\lambda\mu} = c_{ijkl} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6)$$

Cind pentru coeficienții $s_{\lambda\mu}$, legați de componentele s_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 4s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

tabelele au o altă formă; este dată și forma lor.

Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$	Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$
1, $\bar{1}$ 21 comp., 18 inv.	c_{11} c_{12} c_{13} c_{14} c_{15} c_{16} c_{22} c_{23} c_{24} c_{25} c_{26} c_{33} c_{34} c_{35} c_{36} c_{44} c_{45} c_{46} c_{55} c_{56} c_{66}	2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 13 comp., 12 inv.	c_{11} c_{12} c_{13} 0 c_{15} 0 c_{22} c_{23} 0 c_{25} 0 c_{33} 0 c_{35} 0 c_{44} 0 c_{46} c_{55} 0 c_{66}

Tabelul E.18 (continuare)

Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$	Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 13 comp., 12 inv.	c_{11} c_{12} c_{13} 0 0 c_{16} c_{22} c_{23} 0 0 c_{26} c_{33} 0 0 c_{36} c_{44} c_{45} 0 c_{55} 0 c_{66}	32, $3m$ $\bar{3}m'$ 6 comp. *	c_{11} c_{12} c_{13} c_{14} 0 0 c_{11} c_{13} $-c_{14}$ 0 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{44} c_{14} c_{66}
222, $mm2$, mmm 9 comp.	c_{11} c_{12} c_{13} 0 0 0 c_{22} c_{23} 0 0 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{55} 0 c_{66}	4, $\bar{4}$, $4/m$ 7 comp. 6 inv.	s_{11} s_{12} s_{13} s_{14} 0 0 s_{11} s_{13} $-s_{14}$ 0 0 s_{33} 0 0 0 s_{44} 0 0 s_{44} $2s_{14}$ s_{66}
		422, $4mm$, $42m$, $4/mmm$ 6 comp.	c_{11} c_{12} c_{13} 0 0 c_{16} c_{11} c_{13} 0 0 $-c_{16}$ c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{44} 0 c_{66}
3, $\bar{3}$ 7 comp., 6 inv.*	c_{11} c_{12} c_{13} c_{14} $-c_{25}$ 0 c_{11} c_{13} $-c_{14}$ c_{25} 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 c_{25} c_{44} c_{14} c_{66}	6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞ , ∞/m , $\infty2$, ∞m , $\infty/m m$ 5 comp. *	c_{11} c_{12} c_{13} 0 0 0 c_{11} c_{13} 0 0 0 c_{33} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{44} 0 c_{66}
	s_{11} s_{12} s_{13} s_{14} $-s_{25}$ 0 s_{11} s_{13} $-s_{14}$ s_{25} 0 s_{33} 0 0 0 s_{44} 0 $2s_{25}$ s_{14} , $2s_{14}$ s_{66}	23, $m3$, 432, $43m$, $m3m$ 3 comp.	c_{11} c_{12} c_{12} 0 0 0 c_{11} c_{12} 0 0 0 c_{11} 0 0 0 c_{44} 0 0 c_{44} 0 c_{44}
		$\infty\infty$, $\infty\infty m$ 2 comp.**	

* În clasele 3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞ , ∞/m , $\infty2$, ∞m , $\infty/m m$, $c_{ee} = 1/2 (c_{11} - c_{12})$, $s_{ee} = 2(s_{11} - s_{12})$.

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$ $c_{44} = 1/2 (c_{11} - c_{12})$, $s_{44} = 2(s_{11} - s_{12})$.

$[V^2]^2$ — tensorul de rangul patru, p. simetric în raport cu două perechi de indici :

$$p_{ijkl} = p_{jikl} = p_{ijlk}$$

Sînt dați coeficienții $p_{\lambda\mu}$, legați de componentele p_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$p_{\lambda\mu} = p_{ijkl} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3).$$

Cînd pentru coeficienții $\pi_{\lambda\mu}$, legați de componentele tensorului π_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$\pi_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

tabelele au altă formă, sînt date și aceste tabele.

Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$	Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$
1, $\bar{1}$ 36 comp., 33 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & p_{15} & p_{16} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & p_{24} & p_{25} & p_{26} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & p_{34} & p_{35} & p_{36} \\ p_{41} & p_{42} & p_{43} & p_{44} & p_{45} & p_{46} \\ p_{51} & p_{52} & p_{53} & p_{54} & p_{55} & p_{56} \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & p_{64} & p_{65} & p_{66} \end{matrix}$	3, $\bar{3}$ 12 comp., 11 inv. *	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & -p_{25} & p_{16} \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & -p_{14} & p_{25} & -p_{16} \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ p_{41} & -p_{41} & 0 & p_{44} & p_{45} & p_{52} \\ -p_{52} & p_{52} & 0 & -p_{45} & p_{44} & p_{41} \\ -p_{16} & p_{16} & 0 & p_{25} & p_{14} & p_{66} \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 \parallel X_2 , m \perp X_2) 20 comp., 19 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & p_{15} & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & p_{25} & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & p_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & p_{46} \\ p_{51} & p_{52} & p_{53} & 0 & p_{55} & 0 \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & p_{64} & 0 & p_{66} \end{matrix}$		$\begin{matrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{14} & -\pi_{25} & 2\pi_{62} \\ \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{13} & -\pi_{14} & \pi_{25} & -2\pi_{62} \\ \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{41} & -\pi_{41} & 0 & \pi_{44} & \pi_{45} & 2\pi_{52} \\ -\pi_{52} & \pi_{52} & 0 & -\pi_{45} & \pi_{44} & 2\pi_{41} \\ -\pi_{62} & \pi_{62} & 0 & \pi_{25} & \pi_{14} & \pi_{66} \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 \parallel X_3 , m \perp X_3) 20 comp., 19 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & p_{16} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & p_{26} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & p_{36} \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{54} & p_{55} & 0 \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$	32, 3m $\bar{3}m$ 8 comp. *	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & -p_{14} & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ p_{41} & -p_{41} & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{14} & p_{66} \end{matrix}$
222, mm2, mmm 12 comp.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$		$\begin{matrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{14} & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{13} & -\pi_{14} & 0 & 0 \\ \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{41} & -\pi_{41} & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 2\pi_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{14} & \pi_{66} \end{matrix}$

* În clasele 3, $\bar{3}$, 32, 3m, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, 6m, 622, 6mm, 6/mmm, ∞ , ∞/m , $\infty 2$, ∞m , ∞/mmm $p_{45} = \frac{1}{2} (p_{11} - p_{12})$, $\pi_{40} = \pi_{11} - \pi_{12}$

Tabelul E. 19 (continuare)

Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$	Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$
6, $\bar{6}$, 6/m ∞ , ∞/m 8 comp. *	$p_{11} \ p_{12} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ p_{16}$ $p_{12} \ p_{11} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ -p_{16}$ $p_{31} \ p_{31} \ p_{33} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ p_{45} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ -p_{45} \ p_{44} \ 0$ $-p_{16} \ p_{16} \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{66}$	422, 4mm, 42m, 4/mmm 7 comp.	$p_{11} \ p_{12} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{12} \ p_{11} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{31} \ p_{31} \ p_{33} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{66}$
	$\pi_{11} \ \pi_{12} \ \pi_{13} \ 0 \ 0 \ 2\pi_{62}$ $\pi_{12} \ \pi_{11} \ \pi_{13} \ 0 \ 0 \ -2\pi_{62}$ $\pi_{31} \ \pi_{31} \ \pi_{33} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ \pi_{44} \ \pi_{45} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ -\pi_{45} \ \pi_{44} \ 0$ $-\pi_{62} \ \pi_{62} \ 0 \ 0 \ 0 \ -\pi_{66}$	622, 6mm, 6m2, 6/mmm, $\infty 2$, ∞m , ∞/m 6 comp. *	$p_{11} \ p_{12} \ p_{21} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{21} \ p_{11} \ p_{12} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{12} \ p_{21} \ p_{11} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ -p_{44} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{44}$
4, $\bar{4}$, 4/m 10 comp. 9 inv.	$p_{11} \ p_{12} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ p_{16}$ $p_{12} \ p_{11} \ p_{13} \ 0 \ 0 \ -p_{16}$ $p_{31} \ p_{31} \ p_{33} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ p_{45} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ -p_{45} \ p_{44} \ 0$ $p_{61} \ -p_{61} \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{66}$	432, $\bar{4}3m$, m3m 3 comp. $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 2 comp. **	$p_{11} \ p_{12} \ p_{12} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{12} \ p_{11} \ p_{12} \ 0 \ 0 \ 0$ $p_{12} \ p_{12} \ p_{11} \ 0 \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ 0 \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{44} \ 0$ $0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ p_{44}$

* În clasele 3, $\bar{3}$, 32, 3m, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, 6/m, 622, 6mm, 6/mmm, ∞ , ∞/m , $\infty 2$, ∞m , ∞/m $p_{66} = \frac{1}{2} (p_{11} - p_{22})$, $\pi_{66} = \pi_{11} - \pi_{22}$

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$ $p_{44} = \frac{1}{2} (p_{11} - p_{12})$, $\pi_{44} = \pi_{11} - \pi_{12}$.

Tabelul E.20

$[(V^2)^2]$ — tensorul de rangul patru, n, simetrie față de permutarea indicilor : $n_{kl ij} = n_{ij kl}$

Clasele	n_{ijkl}
1, $\bar{1}$ 45 comp., 42 inv.	$n_{1111} \ n_{1122} \ n_{1133} \ n_{1123} \ n_{1131} \ n_{1112} \ n_{1132} \ n_{1113} \ n_{1121}$ $n_{2222} \ n_{2233} \ n_{2231} \ n_{2212} \ n_{2232} \ n_{2213} \ n_{2221}$ $n_{3333} \ n_{3323} \ n_{3331} \ n_{3312} \ n_{3332} \ n_{3313} \ n_{3321}$ $n_{2333} \ n_{2331} \ n_{2312} \ n_{2313} \ n_{2332} \ n_{2311} \ n_{2321}$ $n_{3131} \ n_{3112} \ n_{3132} \ n_{3113} \ n_{3121} \ n_{3122} \ n_{3123}$ $n_{1212} \ n_{1221} \ n_{1222} \ n_{1213} \ n_{1231} \ n_{1232} \ n_{1233}$ $n_{1313} \ n_{1321} \ n_{1322} \ n_{1323} \ n_{1312} \ n_{1311} \ n_{1314}$

Tabelul E. 20 (continuare)

Clasele	n_{ijkl}								
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 25 comp., 24 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	n_{1131} n_{2231} n_{3331} 0 n_{3131}	0 0 0 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 n_{1232} n_{3232}	n_{1113} n_{2213} n_{3313} 0 n_{3113} 0 0 n_{1313}	0 0 0 n_{2321} 0 n_{1221} n_{3221} 0 n_{2121}
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 25 comp., 24 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{2212} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} n_{3132} 0 n_{3232}	0 0 0 n_{2313} n_{3113} 0 n_{3213} n_{1313}	n_{1121} n_{2221} n_{3321} 0 0 n_{1221} 0 0 n_{2121}
222, $mm2$, mmm 15 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{3131}	0 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 n_{3232}	0 0 0 n_{3113} 0 n_{1313}	0 0 0 n_{1221} 0 n_{2121}
4, $\bar{4}$, $4/m$ 13 comp., 12 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{2212} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131} n_{2331} n_{2323}	0 0 0 n_{3332} 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1313}	n_{2313} n_{1112} n_{3312} 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1313}
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ 9 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{3131}	0 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 n_{3131}	0 0 0 n_{3113} 0 n_{2323}	0 0 0 n_{1221} 0 n_{1312}

Tabelul E.20 (continuare)

Clasele	n_{ijk}								
3, $\bar{3}$ 15 comp., 14 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	n_{1123} $-n_{1123}$ 0 n_{2323}	n_{1131} $-n_{1131}$ 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{1112} n_{3312} $-n_{1113}$ n_{1132} n_{1212} $-n_{1131}$ n_{3131}	n_{1132} $-n_{1132}$ 0 n_{2332} 0 $-n_{1131}$ n_{3131}	n_{1113} $-n_{1113}$ 0 0 n_{2332} n_{1123} $-n_{2331}$ n_{2323}	$-n_{1112}$ $-n_{1112}$ $-n_{3312}$ $-n_{1113}$ n_{1132} n_{1221} $-n_{1131}$ n_{1123} n_{1212}
32, $3m$, $\bar{3}m$ 10 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	n_{1123} $-n_{1123}$ 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{1132} n_{1212}	n_{1132} $-n_{1132}$ 0 n_{2332} 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{2332} n_{1123} 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{1132} n_{1221} 0 n_{1123} n_{1212}
6, $\bar{6}$ $6/m$, ∞ , ∞/m 11 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{1112} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131} $-n_{2331}$ n_{2323}	0 0 0 0 n_{2332} n_{1221} 0 0 n_{1212}	$-n_{1112}$ $-n_{1112}$ $-n_{3312}$ 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1212}
622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty2$, ∞m , ∞/mmm 8 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323} n_{3131}	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0 0	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131} n_{2323}	0 0 0 0 n_{2332} n_{1221} 0 0 n_{1212}	0 0 0 0 0 0 0 0 n_{1212}
23, $m\bar{3}$ 5 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1122} n_{1122} n_{1111}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{2323} n_{2332} n_{3232}	0 0 0 0 0 n_{2332} 0 n_{3232}	0 0 0 0 0 n_{2332} 0 n_{3232}	0 0 0 0 0 0 0 0 n_{3232}

Tabelul E.20 (continuare)

Clasele	n_{ijkl}								
432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ 4 comp. $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 3 comp. **	n_{1111}	n_{1122}	n_{1122}	0	0	0	0	0	0
		n_{1111}	n_{1122}	0	0	0	0	0	0
			n_{1111}	0	0	0	0	0	0
				n_{2323}	0	0	n_{2332}	0	0
					n_{2323}	0	0	n_{2332}	0
						n_{2323}	0	0	n_{2332}
							n_{2323}	0	0
								n_{2323}	0
									n_{2323}
									n_{2323}

* În clasele $3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m, 6, \bar{6}, 6/m, 622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, \infty, \infty/m, \infty2, \infty m, \infty/mmm, n_{1111} = n_{1122} + n_{1212} + n_{1221}$.

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $n_{1111} = n_{1122} + n_{2323} + n_{2332}$.

Tabelul E.21

$[V]^2 V^2$ — tensorul de rangul patru, h , simetrie în raport cu doi indici: $h_{ijkl} = h_{ijkl}$

Clasele	h_{ijkl}								
1, $\bar{1}$ 54 comp., 51 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	h_{1123}	h_{1131}	h_{1112}	h_{1132}	h_{1113}	h_{1121}
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	h_{2223}	h_{2231}	h_{2212}	h_{2232}	h_{2213}	h_{2221}
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	h_{3323}	h_{3331}	h_{3312}	h_{3332}	h_{3313}	h_{3321}
	h_{2311}	h_{2322}	h_{2333}	h_{2323}	h_{2331}	h_{2312}	h_{2332}	h_{2313}	h_{2321}
	h_{3111}	h_{3122}	h_{3133}	h_{3123}	h_{3131}	h_{3112}	h_{3132}	h_{3113}	h_{3121}
	h_{1211}	h_{1222}	h_{1233}	h_{1223}	h_{1231}	h_{1212}	h_{1232}	h_{1213}	h_{1221}
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2, m \perp X_2$) 28 comp., 27 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	h_{1131}	0	0	h_{1113}	0
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	0	h_{2231}	0	0	h_{2213}	0
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	0	h_{3331}	0	0	h_{3313}	0
	0	0	0	h_{2323}	0	h_{2312}	h_{2332}	0	h_{2331}
	h_{3111}	h_{3122}	h_{3133}	0	h_{3131}	0	0	h_{3113}	0
	0	0	0	h_{1223}	0	h_{1212}	h_{1232}	0	h_{1231}
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3, m \perp X_3$) 28 comp., 27 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	h_{1112}	0	0	h_{1121}
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	0	0	h_{2212}	0	0	h_{2221}
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	0	0	h_{3312}	0	0	h_{3321}
	0	0	0	h_{2323}	h_{2331}	0	h_{2332}	h_{2313}	0
	0	0	0	h_{3123}	h_{3131}	0	h_{3132}	h_{3113}	0
	h_{1211}	h_{1222}	h_{1233}	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1221}

Tabelul E. 21 (continuare)

Clasele	h_{ijkl}								
222, $mm2$, mmm 15 comp.	h_{1111} h_{2211} h_{3311} 0 0 0	h_{1122} h_{2222} h_{3322} 0 0 0	h_{1133} h_{2233} h_{3333} 0 0 0	0 0 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 0 h_{3131} 0	0 0 0 0 0 h_{1212}	0 0 0 h_{2332} 0 0	0 0 0 0 h_{3113} 0	0 0 0 0 0 h_{1221}
$4, \bar{4}, 4/m$ 14 comp., 13 inv.	h_{1111} h_{1122} h_{3311} 0 0 $h_{1211} - h_{1211}$	h_{1122} h_{1111} h_{3311} 0 0 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	0 0 0 h_{2323} h_{3123} 0	0 0 0 h_{2331} h_{3131} 0	h_{1112} h_{2212} h_{3312} 0 0 h_{1212}	0 0 0 0 0 0	0 0 0 $h_{3131} - h_{3123}$ $-h_{2331}$ 0	$-h_{2212}$ $-h_{1112}$ $-h_{3312}$ 0 0 h_{1212}
$422, 4mm, \bar{4}2m,$ $4/mmm$ 8 comp.,	h_{1111} h_{1122} h_{3311} 0 0 0	h_{1122} h_{1111} h_{3311} 0 0 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	0 0 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 0 0 h_{1212}	0 0 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 0 0 h_{1212}
$3, \bar{3}$ 18 comp., 17 inv. *	h_{1111} h_{1122} h_{3311} $h_{2311} - h_{2311}$ $h_{3111} - h_{3111}$ $h_{1211} - h_{1211}$	h_{1122} h_{1111} h_{3311} $h_{2311} - h_{2311}$ $h_{3111} - h_{3111}$ 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	h_{1123} h_{1123} 0 h_{2323} h_{3123} $-h_{1113}$	h_{1131} h_{1131} 0 h_{2331} h_{3131} h_{1132}	h_{1112} h_{2212} h_{3312} h_{3111} h_{2311} h_{1212}	h_{1132} h_{1132} 0 h_{3131} h_{2331} $-h_{1131}$	h_{1113} h_{1113} 0 h_{3123} h_{2323} h_{1123}	$-h_{2212}$ $-h_{1112}$ $-h_{3312}$ $-h_{3111}$ h_{2311} h_{1212}
$32, 3m, \bar{3}m$ 10 comp. **	h_{1111} h_{1122} h_{3311} $h_{2311} - h_{2311}$ 0 0	h_{1122} h_{1111} h_{3311} $h_{2311} - h_{2311}$ 0 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	h_{1123} $-h_{1123}$ 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 0 h_{3131} h_{1132}	0 0 0 0 h_{2311} h_{1212}	h_{1132} $-h_{1132}$ 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 0 h_{2323} h_{1123}	0 0 0 0 h_{2311} h_{1212}
$6, \bar{6}, 6/m, \infty$ ∞/m 12 comp. *	h_{1111} h_{1122} h_{3311} 0 0 $h_{1211} - h_{1211}$	h_{1122} h_{1111} h_{3311} 0 0 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	0 0 0 h_{2323} h_{3123} 0	0 0 0 h_{2331} h_{3131} 0	h_{1112} h_{2212} h_{3312} 0 0 h_{1212}	0 0 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 h_{3123} h_{2323} 0	$-h_{2212}$ $-h_{1112}$ $-h_{3312}$ 0 0 h_{1212}
$622, 6mm, \bar{6}m2,$ $6/mmm, \infty2, \infty m$ ∞/m 7 comp. **	h_{1111} h_{1122} h_{3311} 0 0 0	h_{1122} h_{1111} h_{3311} 0 0 0	h_{1133} h_{1133} h_{3333} 0 0 0	0 0 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 0 0 h_{1212}	0 0 0 h_{3131} 0 0	0 0 0 h_{2323} 0 0	0 0 0 0 0 h_{1212}

Tabelul E.21 (continuare)

Clasele	h_{ijkl}								
23, $m\bar{3}$ 5 comp.	h_{1111}	h_{1122}	h_{2211}	0	0	0	0	0	0
	h_{2211}	h_{1111}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{2211}	h_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0	0
	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2332}	0
	0	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2332}
432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ 3 comp. $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 2 comp. ***	h_{1111}	h_{1122}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1122}	h_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0	0
	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0
	0	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}

* În clasele $3, \bar{3}, 6, \bar{6}, 6/m, \infty, \infty/m$, $h_{1111} = h_{1122} + 2h_{1112}$, iar $h_{2212} - h_{1112} = 2h_{1211}$.

** În clasele $32, 3m, \bar{3}m, 622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, \infty2, \infty m, \infty/mmm$, $h_{1111} = h_{1122} + h_{1112}$.

*** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $h_{1111} = h_{1122} + 2h_{2323}$.

Tabelul E.22

V^4 — tensorul de rangul patru, b

Clasele	b_{ijkl}								
1, $\bar{1}$ 81 comp., 78 inv.	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	b_{1123}	b_{1131}	b_{1112}	b_{1122}	b_{1113}	b_{1121}
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	b_{2223}	b_{2231}	b_{2212}	b_{2232}	b_{2213}	b_{2221}
	b_{3311}	b_{3322}	b_{3333}	b_{3323}	b_{3331}	b_{3312}	b_{3332}	b_{3313}	b_{3321}
	b_{2311}	b_{2322}	b_{2333}	b_{2323}	b_{2331}	b_{2312}	b_{2332}	b_{2313}	b_{2321}
	b_{3111}	b_{3122}	b_{3133}	b_{3123}	b_{3131}	b_{3112}	b_{3132}	b_{3113}	b_{3121}
	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	b_{1223}	b_{1231}	b_{1212}	b_{1232}	b_{1213}	b_{1221}
	b_{3211}	b_{3222}	b_{3233}	b_{3223}	b_{3231}	b_{3212}	b_{3232}	b_{3213}	b_{3221}
	b_{1311}	b_{1322}	b_{1333}	b_{1323}	b_{1331}	b_{1312}	b_{1332}	b_{1313}	b_{1321}
	b_{2111}	b_{2122}	b_{2133}	b_{2123}	b_{2131}	b_{2112}	b_{2132}	b_{2113}	b_{2121}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	b_{1131}	0	0	b_{1113}	0
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	0	b_{2231}	0	0	b_{2213}	0
	b_{3311}	b_{3322}	b_{3333}	0	b_{3331}	0	0	b_{3313}	0
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 41 comp., 40 inv.	0	0	0	b_{2323}	0	b_{2312}	b_{2332}	0	b_{2321}
	b_{3111}	b_{3122}	b_{3133}	0	b_{3131}	0	0	b_{3113}	0
	0	0	0	b_{1223}	0	b_{1212}	b_{1232}	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3223}	0	b_{3212}	b_{3232}	b_{3221}	b_{3211}
	b_{1311}	b_{1322}	b_{1333}	0	b_{1331}	0	0	b_{1313}	0
	0	0	0	b_{2123}	0	b_{2112}	b_{2132}	0	b_{2121}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	b_{1131}	0	0	b_{1113}	0
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	0	b_{2231}	0	0	b_{2213}	0

Tabelul E.22 (continuare)

Claselo	b_{ijk}								
2, m , $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 41 comp., 40 inv.	b_{1111} b_{2211} b_{3311} 0 0 b_{1211} 0 0 b_{2111}	b_{1122} b_{2222} b_{3322} 0 0 b_{1222} 0 0 b_{2122}	b_{1133} b_{2233} b_{3333} 0 0 b_{1233} 0 0 b_{2133}	0 0 0 b_{2323} b_{3123} 0 b_{3223} b_{1323} 0	0 0 0 b_{2331} b_{3131} 0 b_{3231} b_{1331} 0	b_{1112} b_{2212} b_{3312} 0 0 b_{1212} 0 0 b_{2112}	0 0 0 b_{2332} b_{3132} 0 b_{3232} b_{1332} 0	0 0 0 b_{2313} b_{3113} 0 b_{3213} b_{1313} 0	b_{1121} b_{2221} b_{3321} 0 0 b_{1221} 0 0 b_{2121}
222, $mm2$, mmm 21 comp.	b_{1111} b_{2211} b_{3311} 0 0 0 0 0 0	b_{1122} b_{2222} b_{3322} 0 0 0 0 0 0	b_{1133} b_{2233} b_{3333} 0 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2323} 0 0 b_{3223} 0 0	0 0 0 0 b_{3131} 0 b_{1331} 0	3 0 0 0 0 b_{1212} 0 0 b_{2112}	0 0 0 b_{2332} 0 0 b_{3232} 0	0 0 0 0 b_{3113} 3 b_{1313} 0	0 0 0 0 0 b_{1221} 0 0 b_{2121}
4, $\bar{4}$, $4/m$ 21 comp., 20 inv.	b_{1111} b_{1122} b_{3311} 0 0 b_{1211} 0 0 $-b_{1222}$	b_{1122} b_{1111} b_{3311} 0 0 b_{1222} 0 0 $-b_{1211}$	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 b_{1233} 0 0 $-b_{1233}$	0 0 0 b_{2323} b_{3123} 0 b_{3113} $-b_{2313}$ 0	0 0 0 b_{2331} b_{3131} 0 b_{3132} b_{2332} 0	b_{1112} b_{2212} b_{3312} 0 0 b_{1212} 0 0 b_{1221}	0 0 0 b_{2332} b_{3132} 0 b_{3131} $-b_{2331}$ 0	0 0 0 b_{2313} b_{3113} 0 b_{3123} b_{2323} 0	$-b_{2212}$ $-b_{1112}$ $-b_{3312}$ 0 0 b_{1221} 0 0 b_{1212}
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ 11 comp.	b_{1111} b_{1122} b_{3311} 0 0 0 0 0 0	b_{1122} b_{1111} b_{3311} 0 0 0 0 0 0	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2323} 0 0 b_{3113} 0 0	0 0 0 0 b_{3131} 0 b_{2332} 0	0 0 0 0 0 b_{1212} 0 b_{1221}	0 0 0 b_{2332} 0 0 b_{3131} 0	0 0 0 b_{2313} b_{3113} 0 b_{2323} 0	0 0 0 0 0 b_{1221} 0 b_{1212}
3, $\bar{3}$ 27 comp., 26 inv.*	b_{1111} b_{1122} b_{3311} b_{2311} b_{3111} b_{1211} b_{3211} b_{1311} $-b_{1222}$	b_{1122} b_{1111} b_{3311} $-b_{2311}$ $-b_{3111}$ b_{1222} $-b_{3211}$ $-b_{1311}$ $-b_{1211}$	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 b_{1233} 0 0 $-b_{1233}$	b_{1123} $-b_{1123}$ 0 b_{2323} b_{3123} $-b_{1113}$ b_{3113} $-b_{2313}$ $-b_{1113}$	b_{1131} $-b_{1131}$ 0 b_{2331} b_{3131} b_{1132} $-b_{3132}$ b_{2332} b_{1132}	b_{1112} b_{2212} b_{3312} $-b_{1311}$ b_{3211} b_{1212} $-b_{3111}$ b_{2311} b_{1221}	b_{1132} $-b_{1132}$ 0 b_{2332} b_{3132} $-b_{1131}$ b_{3131} $-b_{2331}$ $-b_{1131}$	b_{1113} $-b_{1113}$ 0 b_{2313} b_{3113} b_{1123} $-b_{3123}$ b_{2323} b_{1123}	$-b_{2212}$ $-b_{1112}$ $-b_{3312}$ $-b_{1311}$ b_{3211} b_{1221} $-b_{3111}$ b_{2311} b_{1212}

Tabelul E.22 (continuare)

Clasele	b_{ijk}								
32, $3m$, $\bar{3}m$ 14 comp. **	b_{1111} b_{1122} b_{3311} b_{2311} 0 0 b_{3211} 0 0	b_{1122} b_{1111} b_{3311} $-b_{2311}$ 0 0 $-b_{3211}$ 0 0	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 0 0 0 0	b_{1123} $-b_{1123}$ 0 b_{2323} 0 0 b_{3113} 0 0 b_{3113} 0 0	0 0 0 0 b_{3131} b_{1132} 0 b_{2332} b_{1132}	0 0 0 0 b_{3211} b_{1212} 0 b_{2311} b_{1221}	b_{1122} $-b_{1132}$ 0 b_{2332} 0 0 b_{3131} 0 0 b_{3131} 0 0	0 0 0 0 b_{3113} b_{1123} 0 b_{2323} b_{1123}	0 0 0 0 b_{3211} b_{1221} 0 b_{2311} b_{1212}
6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞ , ∞/m 19 comp. *	b_{1111} b_{1122} b_{3311} 0 0 b_{1211} 0 0 $-b_{1222}$	b_{1122} b_{1111} b_{3311} 0 0 b_{1222} 0 0 $-b_{1211}$	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 b_{1233} 0 0 $-b_{1233}$	0 0 0 b_{2323} b_{3123} 0 b_{3113} $-b_{2313}$ 0	0 0 0 b_{2331} b_{3131} 0 b_{3132} b_{2332} 0	b_{1112} b_{2212} b_{3312} 0 0 b_{1212} 0 0 b_{1221}	0 0 0 b_{2332} b_{3132} 0 b_{3131} $-b_{2331}$ 0	0 0 $-b_{3312}$ b_{2313} b_{3113} 0 0 $-b_{3123}$ b_{2323} 0	$-b_{2212}$ $-b_{1112}$ $-b_{3312}$ 0 0 b_{1221} 0 0 b_{1212}
622, $6mm$, $6m2$, $6/mmm$, $\infty2$, ∞m , ∞/mmm 10 comp. **	b_{1111} b_{1122} b_{3311} 0 0 0 0 0 0	b_{1122} b_{1111} b_{3311} 0 0 0 0 0 0	b_{1133} b_{1133} b_{3333} 0 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2323} 0 b_{3131} 0 b_{3113} 0 b_{2332} 0	0 0 0 0 b_{3131} 0 0 b_{2332} 0 0 b_{1221}	0 0 0 0 0 b_{1212} 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2332} 0 b_{3113} 0 b_{3131} 0 b_{2323} 0	0 0 0 0 b_{3113} 0 0 b_{2323} 0 0 0	0 0 0 0 0 b_{1221} 0 0 0 0 b_{1212}
23, $m3$ 7 comp.	b_{1111} b_{2211} b_{1112} 0 0 0 0 0 0	b_{1122} b_{1111} b_{2211} 0 0 0 0 0 0	b_{2211} b_{1122} b_{1111} 0 3 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2323} 0 0 b_{3223} 0 0 0 0	0 0 0 0 b_{2323} 0 0 b_{2323} 0 0 b_{3223} 0	0 0 0 0 0 b_{2323} 0 0 0 0 0	0 0 0 b_{2332} 0 b_{2332} 0 b_{3232} 0 0	0 0 0 0 b_{2332} 0 0 b_{2332} 0 0 0	0 0 0 0 0 b_{2323} 0 0 0 0 b_{2323}

Clasele	b_{ijkl}								
432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ 4 comp., $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 3 comp. ***	b_{1111}	b_{1122}	b_{1122}	0	0	0	0	0	0
	b_{1122}	b_{1111}	b_{1122}	0	0	0	0	0	0
	b_{1122}	b_{1122}	b_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0
	0	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}
	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0	0
	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0
	0	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}
	0	0	0	0	0	0	0	0	b_{2323}

* În clasele 3, $\bar{3}$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞ , $\infty'm$, $b_{1111} = b_{1122} + b_{1212} + b_{1221}$, iar $b_{1112} = b_{2212} = b_{1222} = b_{1211}$.

** În clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m și ∞/mmm , $b_{1111} = b_{1122} + b_{1212} + b_{1221}$.

*** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $b_{1111} = b_{1122} + b_{2323} + b_{2332}$.

Tabelul E.23

$V[[V^2]^2]$ — tensorul de rangul cinci, Q , simetric în raport cu două perechi de indici și în raport cu permutarea acestor perechi: $Q_{mtijkl} = Q_{mtikjl} = Q_{mtjikl} = Q_{mkljij}$, pentru câteva clase cristalografice

Pentru celelalte clase, v. Koptik (1966). Sînt dați coeficienții $Q_{m\lambda\mu}$, legați de componentele Q_{mtijkl} prin regulile de recalculare

$$Q_{m\lambda\mu} = \begin{cases} Q_{mtijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2Q_{mtijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \\ 2Q_{mtijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 4Q_{mtijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

Sînt dați numai indicii pentru coeficienții diferiți de zero: expresiile de genul $216 = 111 + 3 \cdot 122$ înseamnă $Q_{216} = Q_{111} + 3Q_{122}$.

Clasa 222 (12 comp.): 114, 124, 134, 156, 215, 225, 235, 246, 316, 326, 336, 345.

Clasa 32 (8 comp.): $166 = 2 \cdot 112 = -2(111 + 122)$, $216 = 111 + 3 \cdot 122$, $226 = -3 \cdot 111 - 122$, $236 = 2 \cdot 123 = -2 \cdot 113$, $225 = -114$, $215 = -124$, $246 = -156 = 114 - 124$, $235 = -134$, $245 = 2 \cdot 144 = -2 \cdot 155$, $346 = 2 \cdot 325 = -2 \cdot 315$.

Clasa $42m$ (7 comp.): $144 = 225$, $124 = 215$, $134 = 235$, $156 = 246$, $316 = 326$, 336 , 345 .

Clasa $\bar{4}3m$ (3 comp.): $114 = 225 = 336$, $124 = 235 = 316 = 134 = 215 = 326$, $156 = 246 = 345$.

Clasa 432 (1 comp.): $124 = 235 = 316 = -134 = -215 = -326$.

$[[V^2]^3]$ — tensorul de rangul șase, C, simetric în raport cu prima, cu a doua și cu a treia pereche de indici precum și în raport cu permutările lor, pentru unele clase cristalografice și unele clase limită :

$$C_{ijklmn} = C_{jiklmn} = C_{ijlkmn} = C_{ijklnm} = C_{ijmnlk} = C_{klmijn}$$

Pentru celelalte clase v. Mason (1966) sau Fumi (1951) 1952, b).

Sînt dați coeficienții $C_{\lambda\mu\nu}$, legați de componentele tensoriale, C_{ijklmn} , prin regulile de recalculare

$$C_{\lambda\mu\nu} = C_{ijklmn} \quad (ij \leftrightarrow \lambda, kl \leftrightarrow \mu, mn \leftrightarrow \nu = 1, \dots, 6).$$

Sînt dați nu numai indicii pentru coeficienții diferiți de zero (v. explicația de la tabelul precedent).

Clasele 222, $mm2$, mmm (20 comp.) : 111, 112, 113, 122, 123, 133, 144, 155, 166, 222, 223, 233, 244, 255, 266, 333, 344, 355, 366, 456.

Clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$ (14 comp.) 111, 112, 113, 114, 122 = 111 + 112 - 222, 123, 124, 133, 134, 144, 155, 156 = $1/2$ (114 + 3 · 124), 166 = - $1/4$ (2 · 111 + 112 - 3 · 222), 222, 223 = 113, 224 = - 114 - 2 · 124, 233 = 133, 234 = - 134, 244 = 155, 255 = 144, 256 = $1/2$ (114 - 124), 266 = $1/4$ (2 · 111 - 112 - 222), 333, 344 = 355, 356 = 134, 366 = $1/2$ (113 - 123), 444 = - 455, 456 = - $1/2$ (144 - 155), 466 = 124.

Clasele 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ (12 comp.) : aceiași coeficienți ca și în clasele 222, $mm2$, mmm , însă legați prin relațiile : 122 = 112, 222 = 111, 223 = 113, 233 = 133, 244 = 155, 255 = 144, 266 = 166, 344 = 355.

Clasele 432, $\bar{4}3m$, $m3m$ (6 comp.) : 111 = 222 = 333, 112 = 113 = 122 = 133 = 223 = 233, 123, 144 = 255 = 366, 155 = 166 = 244 = 266, = 334 = 355, 456.

Clasele $\infty\infty$, $\infty\infty m$ (3 comp.) : sînt diferite de zero aceleași componente ca și în clasele 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, fiind însă legate prin relațiile suplimentare : 144 = $1/2$ (122 - 123), 155 = $1/4$ (111 - 112), 456 = $1/8$ (111 - 3 · 112 + 2 · 123).

Tabelul E.25

$[V^2][[V^2]^2]$ — tensorul de rangul șase, q, simetric în raport cu prima, a doua și a treia pereche de indici precum și în raport cu permutarea perechii a doua cu a treia, pentru cîteva clase cristalografice și cîteva clase limită : $q_{ijklmn} = q_{jiklmn} = q_{ijlkmn} = q_{ijklnm} = q_{ijmnlk} = q_{klmijn}$

Pentru celelalte clase, v. Vedam și Srinivasan (1967).

Sînt dați coeficienții $q_{\lambda\mu\nu}$, legați de componentele q_{ijklmn} prin regulile de recalculare

$$q_{\lambda\mu\nu} = q_{ijklmn} \quad (ij \leftrightarrow \lambda, kl \leftrightarrow \mu, mn \leftrightarrow \nu = 1, \dots, 6).$$

Sînt cuprinși numai indicii pentru componentele diferite de zero (v. explicațiile de la tabelul E.23).

Clasele 222, $mm2$, mmm (39 comp.) : 111, 112, 113, 122, 123, 133, 144, 155, 166, 211, 212, 213, 222, 223, 233, 244, 255, 266, 311, 312, 313, 322, 323, 333, 344, 355, 366, 414, 424, 456, 515, 525, 535, 546, 616, 626, 636, 645.

Clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$ (26 comp.): 111, 112, 113, 114, 122 = 111 + 211 - 222, 123, 124, 133, 134, 144, 155, 156 = $1/2(114 + 124 + 2 \cdot 214)$, 166 = - $1/4(2 \cdot 111 + 2 \cdot 112 - 211 - 3 \cdot 222)$, 211, 212 = 111 + 112 - 222, 213 = 123, 214, 222, 223 = 113, 224 = - 114 - 124 - 214, 233 = 133, 234 = - 134, 244 = 155, 255 = 144, 256 = $1/2(114 - 124)$, 266 = $1/2(2 \cdot 111 - 2 \cdot 112 + 211 - 222)$, 311, 312, 313, 314, 322 = 311, 323 = 313, 324 = - 314, 333, 344 = 355, 356 = 314, 366 = $1/2(311 - 312)$, 411, 412, 413, 414, 422 = - 411 - 2 \cdot 412, 423 = - 413, 424, 434, 444 = - 455, 456 = $1/2(424 - 414)$, 466 = 412, 516 = $1/2(411 + 3 \cdot 412)$, 525 = 414, 526 = $1/2(411 - 412)$, 535 = 413, 545 = - 444, 546 = $1/2(424 - 414)$, 615 = $1/2(114 + 2 \cdot 124)$, 616 = - $1/4(2 \cdot 111 + 211 - 3 \cdot 222)$, 625 = $1/2(114 - 214)$, 626 = $1/4(2 \cdot 111 - 222)$, 635 = 134, 636 = $1/2(113 - 123)$, 645 = - $1/2(144 - 155)$, 646 = $1/2(124 + 214)$.

Clasele 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ (22 comp.): aceiași coeficienți ca și în clasele 222, $mm2$, mmm , însă legați prin relațiile: 211 = 122, 212 = 112, 213 = 123, 222 = 111, 223 = 113, 233 = 133, 244 = 155, 255 = 144, 266 = 166, 322 = 311, 323 = 313, 344 = 355, 515 = 424, 525 = 414, 535 = 434, 546 = 456, 616 = 626.

Clasele 432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ (9 comp.): 111 = 222 = 333, 112 = 113 = 212 = 223 = 313 = 323, 122 = 133 = 211 = 233 = 311 = 322, 123 = 213 = 312, 144 = 255 = 333, 155 = 166 = 244 = 266 = 344 = 355, 414 = 525 = 633, 421 = 431 = 515 = 535 = 616 = 626, 456 = 546 = 645.

Clasele $\infty\infty$, $\infty\infty n$ (4 comp.): egalitățile precedente, completate cu relațiile: 144 = $1/2(122 - 123)$, 155 = $1/4(111 - 2 \cdot 112 + 122)$, 414 = $1/2(112 - 123)$, 424 = $1/4(111 - 122)$, 456 = $1/8(111 - 2 \cdot 112 - 122 + 2 \cdot 123)$.

F. FORMA CONTRASĂ DE SCRIERE A TENSORILOR

În fizica teoretică a cristalelor sîntem adesea nevoiți să lucrăm cu tensori de rangul doi simetrici (cu simetria internă $[V^2]$). Dintre aceștia fac parte tensorii deformărilor și ai tensiunilor precum și mulți tensori de material. Legăturile dintre acești tensori sînt exprimate de diferiți tensori de material de rangul patru, șase și de rang și mai înalt, care, cu toată diferența dintre ei, au o proprietate comună: toți sînt simetrici în raport cu perechile de indici, adică au simetria internă $[V^2]^2$, $[V^2]^3$ etc. Cu toate că se pot efectua calcule cu astfel de tensori utilizînd regulile obișnuite ale algebrei tensoriale, s-a dovedit mai comodă utilizarea unor metode speciale de calcul. Aceste metode se bazează pe faptul că o pereche de indici notați cu litere latine, $i, j = 1, 2, 3$, se înlocuiesc cu un indice notat cu literă grecească, λ , care capătă valori de la 1 la 6 (dacă indicii i și j se pot permuta, ei formează împreună 6 combinații diferite). În acest caz, numărul indicilor se micșorează de două ori (ca și cum s-ar micșora de două ori rangul tensorului); este adevărat că acest fapt este compensat de creșterea numărului de valori pe care le capătă fiecare indice. Existența unei simetrii interne suplimentare a tensorilor, adică

posibilitatea de interschimbare a locurilor celorlalte perechi de indici, nu împiedică utilizarea acestei metode; prin urmare, ea poate fi utilizată și în cazul tensorilor de tipul $[[V^2]^2]$, $[V^2][[V^2]^2]$, $[[V^2]^3]$ și altoru asemenea. Mai mult decât atât, printr-o modificare adecvată, metoda este valabilă și pentru tensorii de forma $V[V^2]$, $V[[V^2]^2]$ ș.a.

În cele ce urmează, metoda este formulată pe părți; fiecare parte se referă la un anumit loc al cursului principal, pentru înțelegerea căruia este ea necesară.

Pentru § 51. Tensori ε și σ . Vom înlocui perechea de indici ij cu indicele λ , conform schemei

$$\begin{array}{cccccc} ij & = & 11 & 22 & 33 & 23 & 31 & 12 \\ \lambda & = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array} \quad (F.1)$$

În continuare vom considera că indicii notați cu litere grecești, $\lambda, \mu, \nu, \kappa$, capătă valorile 1, ..., 6, fiind legați de perechile de indici notați cu litere latine, ij, kl etc. prin relațiile (F.1).

Trecerea de la perechea de indici (să zicem ij), la un singur indice (λ) pentru tensorii ε și σ se realizează în diferite moduri. Mărimile ε_λ sînt definite, de obicei, prin relațiile

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{11}, \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_{22}, \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_{33},$$

$$\varepsilon_4 = 2\varepsilon_{23}, \quad \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{31}, \quad \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{12},$$

care sînt reunite în formula

$$\varepsilon_\lambda = \begin{cases} \varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2\varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (F.2)$$

Relațiile care leagă pe ε_λ de ε_{ij} pot fi scrise și în forma

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\varepsilon_\lambda}{2 - \delta_{ij}} \quad (F.3),$$

Mărimile corespunzătoare pentru tensorul tensiunilor, σ^λ vor fi notate cu indice superior, deoarece ele sînt definite prin alte relații, și anume,

$$\sigma^1 = \sigma_{11}, \quad \sigma^2 = \sigma_{22}, \quad \sigma^3 = \sigma_{33},$$

$$\sigma^4 = \sigma_{23}, \quad \sigma^5 = \sigma_{31}, \quad \sigma^6 = \sigma_{12}.$$

Aceste relații sînt reunite în formula

$$\sigma^\lambda = \sigma_{ij} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6). \quad (\text{F.4})$$

În cele ce urmează, la mărimile cu un singur indice literă grecească, care se obțin din componentele unui tensor de rangul doi, după regula (F.2), vom scrie indicele jos, iar la cele care se formează după regula (F.4), sus.

În teoria elasticității cristalelor un rol important îl joacă suma $\sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$. Notățiile introduse permit scrierea ei în forma

$$\sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \sigma^\lambda \varepsilon_\lambda, \quad (\text{F.5})$$

în care, se subînțelege, însumarea se face în raport cu indicii litere grecești, care se repetă, și care se află la niveluri diferite. Pentru satisfacerea egalității (F.5), deosebirea dintre regulile (F.2) și (F.4) este esențială; dacă mărimile care corespund ambilor tensori ar fi formate după aceeași regulă, fie (F.2), fie (F.4), atunci egalitatea (F.5) nu ar fi valabilă. Desigur, s-ar putea trece la indicii litere grecești pentru toți tensorii simetrici de rangul doi, și anume astfel

$$S_\lambda = \begin{cases} S_{ij} & \text{pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3, \\ \sqrt{2} S_{ij} & \text{pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6. \end{cases} \quad (\text{F.6})$$

În acest caz ar fi valabilă și relația (F.5), o asemenea definiție fiind în multe privințe mai comodă. Trecerea însă de la regulile (F.2) și (F.4) la regula (F.6) ar necesita recalcularea valorilor tabelate ale coeficienților elastici și ale altor coeficienți, făcînd astfel dificilă utilizarea literaturii existente; din această cauză, vom folosi, în continuare, modul de notare unanim acceptat, în ciuda neajunsurilor sale evidente.

La trecerea la „noul” sistem de coordonate, construit pe baza $e_{i'} = c_{i'k} e_k$, componentele S_{kl} ale oricărui tensor simetric de rangul doi, S, se transformă după legea

$$S_{i'j'} = c_{i'k} c_{j'l} S_{kl}. \quad (\text{F.7})$$

Mărimile ε_λ și σ^λ suferă și ele următoarele transformări liniare

$$\varepsilon_{\lambda'} = Q_{\lambda'}^\mu \varepsilon_\mu, \quad (\text{F.8})$$

$$\sigma^{\lambda'} = Q_{\mu}^{\lambda'} \sigma^\mu. \quad (\text{F.9})$$

Aceste transformări sînt scrise aici astfel încît indicii liberi, care sînt la fel, să se afle și la același nivel, însumarea făcîndu-se în raport cu indicii care se află la niveluri diferite. Ele sînt determinate de cerința ca în noul sistem de coordonate mărimile $\epsilon_{\lambda'}$ și $\sigma^{\lambda'}$ să fie legate de componentele tensorilor corespunzători prin aceleași reguli, (F.2) și (F.4), ca și în sistemul vechi. Transcriind toți termenii din formulele (F.7) și înlocuind componentele $S_{i'j'}$ și S_{kl} într-un caz cu mărimile $\epsilon_{\lambda'}$ și ϵ_{μ} , după regula (F.2), iar în celălalt caz cu mărimile $\sigma^{\lambda'}$ și σ^{μ} , după regula (F.4), obținem elementele matricelor P și Q

$P_{\lambda'}^{\mu}$	1	2	3	4	5	6
1'	$c_{1'1}^2$	$c_{1'2}^2$	$c_{1'3}^2$	$c_{1'2}c_{1'3}$	$c_{1'3}c_{1'1}$	$c_{1'1}c_{1'2}$
2'	$c_{2'1}^2$	$c_{2'2}^2$	$c_{2'3}^2$	$c_{2'2}c_{2'3}$	$c_{2'3}c_{2'1}$	$c_{2'1}c_{2'2}$
3'	$c_{3'1}^2$	$c_{3'2}^2$	$c_{3'3}^2$	$c_{3'2}c_{3'3}$	$c_{3'3}c_{3'1}$	$c_{3'1}c_{3'2}$
4'	$2c_{2'1}c_{3'1} 2c_{2'2}c_{3'2} 2c_{2'3}c_{3'3} c_{2'2}c_{3'3} + c_{2'3}c_{3'2} c_{2'3}c_{3'1} + c_{2'1}c_{3'3} c_{2'1}c_{3'2} + c_{2'2}c_{3'1}$					
5'	$2c_{3'1}c_{1'1} 2c_{3'2}c_{1'2} 2c_{3'3}c_{1'3} c_{3'2}c_{1'3} + c_{3'3}c_{1'2} c_{3'3}c_{1'1} + c_{3'1}c_{1'3} c_{3'1}c_{1'2} + c_{3'2}c_{1'1}$					
6'	$2c_{1'1}c_{2'1} 2c_{1'2}c_{2'2} 2c_{1'3}c_{2'3} c_{1'2}c_{2'3} + c_{1'3}c_{2'2} c_{1'3}c_{2'1} + c_{1'1}c_{2'3} c_{1'1}c_{2'2} + c_{1'2}c_{2'1}$					
$Q_{\mu}^{\lambda'}$	1	2	3	4	5	6
1'	$c_{1'1}^2$	$c_{1'2}^2$	$c_{1'3}^2$	$2c_{1'2}c_{1'3}$	$2c_{1'3}c_{1'1}$	$2c_{1'1}c_{1'2}$
2'	$c_{2'1}^2$	$c_{2'2}^2$	$c_{2'3}^2$	$2c_{2'2}c_{2'3}$	$2c_{2'3}c_{2'1}$	$2c_{2'1}c_{2'2}$
3'	$c_{3'1}^2$	$c_{3'2}^2$	$c_{3'3}^2$	$2c_{3'2}c_{3'3}$	$2c_{3'3}c_{3'1}$	$2c_{3'1}c_{3'2}$
4'	$c_{2'1}c_{3'1} c_{2'2}c_{3'2} c_{2'3}c_{3'3} c_{2'2}c_{3'3} + c_{2'3}c_{3'2} c_{2'3}c_{3'1} + c_{2'1}c_{3'3} c_{2'1}c_{3'2} + c_{2'2}c_{3'1}$					
5'	$c_{3'1}c_{1'1} c_{3'2}c_{1'2} c_{3'3}c_{1'3} c_{3'2}c_{1'3} + c_{3'3}c_{1'2} c_{3'3}c_{1'1} + c_{3'1}c_{1'3} c_{3'1}c_{1'2} + c_{3'2}c_{1'1}$					
6'	$c_{1'1}c_{2'1} c_{1'2}c_{2'2} c_{1'3}c_{2'3} c_{1'2}c_{2'3} + c_{1'3}c_{2'2} c_{1'3}c_{2'1} + c_{1'1}c_{2'3} c_{1'1}c_{2'2} + c_{1'2}c_{2'1}$					

Aceste matrice diferă una de cealaltă numai prin faptul că în matricea Q elementele care se găsesc în pătratul superior din dreapta conțin coeficientul 2, pe cînd în matricea P , acest coeficient conține elementele care se află în pătratul inferior din stînga. Elementele acestor matrice pot fi exprimate cu ajutorul formulelor

$$\frac{1}{2} (c_{i'k} c_{j'1} + c_{i'1} c_{j'k}) = \frac{P_{\lambda'}^{\mu}}{2 - \delta_{i'j'}} = \frac{Q_{\mu}^{\lambda'}}{2 - \delta_{kl}}, \quad (\text{F.10})$$

în care indicele λ' corespunde perechii $i'j'$, iar indicele μ , perechii kl (de comparat cu formulele (F.3)).

La trecerea de la noul sistem de coordonate la cel vechi, ε_λ și σ^λ se supun, așa cum este ușor de verificat, următoarelor transformări liniare

$$\varepsilon_\mu = Q_\mu^{\lambda'} \varepsilon_{\lambda'}, \quad (\text{F.11})$$

$$\sigma^\mu = P_\lambda^\mu \sigma^{\lambda'}. \quad (\text{F.12})$$

Compararea acestor formule cu formulele (F.8) și (F.9) arată că mărimile de tipul ε_μ pot fi considerate componentele covariante ale unui vector în spațiul cu șase dimensiuni, iar mărimile de tipul σ^μ , componentele contravariante ale altui vector din același spațiu. Diferența dintre legile de transformare pentru aceste mărimi — (F.8) și (F.11) pentru ε_μ , (F.9) și (F.12) pentru σ^μ — arată că baza la care sînt raportate nu este ortonormată (în baza ortonormată într-un spațiu cu șase dimensiuni, sînt exprimate mărimile constituite din componentele unui tensor simetric de rangul doi, după regula (F.6)).

Pentru § 51. Tensorii c și s . Conform legii lui Hooke, tensorii σ și ε sînt corelați prin relația liniară

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (\text{F.13})$$

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (\text{F.14})$$

unde c și s sînt niște tensori de rangul patru. Înlocuind, după schema (F.1), perechea de indici ij cu indicele λ , iar perechea kl cu indicele μ , se poate scrie

$$\sigma^\lambda = c^{\lambda\mu} \varepsilon_\mu, \quad (\text{F.15})$$

$$\varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu} \sigma^\mu. \quad (\text{F.16})$$

Indicii lui c și ai lui s au fost grupați după regulile formulate mai sus. Scriind toți termenii din formulele (F.13) și (F.15) și comparîndu-i, obținem regula de recalculare pentru $c^{\lambda\mu}$

$$c^{\lambda\mu} = c_{ijkl} (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6.) \quad (\text{F.17})$$

Făcînd același lucru cu relațiile (F.14) și (F.16), obținem regula pentru $s_{\lambda\mu}$

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 4s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (\text{F.18})$$

Această regulă se poate scrie, prin analogie cu (F.3), sub forma

$$s_{ijkl} = \frac{s_{\lambda\mu}}{(2 - \delta_{ij})(2 - \delta_{kl})} \quad (\text{F.19})$$

Comparând formulele (F.18) și (F.2), vedem că fiecare indice inferior, egal cu 4, 5 sau 6, determină o dublare a mărimilor de tipul ε_λ sau $s_{\lambda\mu}$ față de componenta corespunzătoare a tensorului; același lucru ni-l arată și formulele (F.3) și (F.19). Dimpotrivă, formulele (F.17) și (F.4) arată că mărimi de tipul c^λ sau $c^{\lambda\mu}$ sînt egale cu componentele corespunzătoare ale tensorului pentru toate valorile indicilor.

Este firesc să presupunem că mărimile $s_{\mu\nu}$, în cazul trecerii la un alt sistem de coordonate, se transformă ca produse a două mărimi de tipul ε_μ , iar $c^{\mu\nu}$ ca produse ale mărimilor de tipul c^μ , adică faptul că $s_{\mu\nu}$ și $c^{\mu\nu}$ reprezintă, respectiv, componentele covariante și componentele contravariante ale unor tensori de rangul doi, în spațiul cu șase dimensiuni. Și, într-adevăr, nu este greu de verificat că trecerea la noul sistem de coordonate este exprimată prin egalitățile

$$s_{x'\lambda'} = P_{x'}^\mu P_{\lambda'}^\nu s_{\mu\nu}, \quad (\text{F.20})$$

$$c^{x'\lambda'} = Q_{\mu'}^{x'} Q_{\nu'}^{\lambda'} c^{\mu\nu}, \quad (\text{F.21})$$

iar transformarea inversă — de la noul sistem de coordonate la cel vechi — se realizează după formulele

$$s_{\mu\nu} = Q_{\mu'}^{x'} Q_{\nu'}^{\lambda'} s_{x'\lambda'}, \quad (\text{F.22})$$

$$c^{\mu\nu} = P_{x'}^\mu P_{\lambda'}^\nu c^{x'\lambda'}. \quad (\text{F.23})$$

Prin urmare, dispunînd corect indicii mărimilor care intră într-o relație tensorială dată, obținem automat regulile de recalculare și formulele de transformare pentru toate mărimile care fac parte din această egalitate (desigur, dacă în relația considerată intră și mărimi ce ne sînt cunoscute). Tocmai în acest scop recurgem aici la această metodă formală.

În unele manuale se recomandă insistent ca pentru raportarea tensorilor coeficienților de elasticitate și coeficienților deformabilității elastice la noile coordonate să se utilizeze formule de forma

$$s_{i'j'k'l'} = c_{i'm} c_{j'n} c_{k'p} c_{l'q} s_{mnpq} \quad (\text{F.24})$$

însă risipa nejustificat de mare de termeni în fiecare dintre ele (81 termeni) îngreuiază calculele, constituind totodată o sursă de erori. Formulele (F.20)–(F.23) sînt probabil mai comode: ele

conțin mai puțini termeni (în total 36), întrunind tocmai acei coeficienți de elasticitate și de deformabilitate elastică, care sînt dați în tabele.

Cu toate că, în principiu, fiecare tensor s-ar putea reprezenta atît prin coeficienți covarianți, cît și prin coeficienți contravarianți, vom conveni ca deformările ϵ_λ , coeficienții de dilatare termică, α_λ , coeficienții deformabilității elastice, $s_{\lambda\mu}$, să-i reprezentăm prin componente covariante, iar tensiunile, σ^λ , coeficienții de termoelasticitate, β^λ , coeficienții de elasticitate, $c^{\lambda\mu}$, prin componente contravariante. Această convenție permite să se scrie toți indicii la un singur nivel, cu toate că acest lucru este mai puțin comod. În textul principal al cărții toți indicii sînt scriși pe un singur nivel, cel inferior, deoarece această formă tradițională de scriere se utilizează în aproape întreaga literatură de cristalofizică existentă. Dimpotrivă, în această anexă indicii covarianți au fost plasați jos, iar cei contravarianți sus, fiind respectată cu strictețe regula ca însumarea să se facă în raport cu indicii litere grecești, care se află obligatoriu la niveluri diferite. Poziția pe nivelul de sus sau cel de jos al indicilor determină, după cum s-a arătat mai înainte, raportul dintre mărimea dată și componentele tensoriale corespunzătoare precum și legea de transformare a acestora, la schimbarea sistemului de coordonate.

Pentru § 52. Matricele P și Q pentru o rotație în jurul axei X_3 . Unei rotații a sistemului de coordonate cartezian, cu un unghi φ în jurul axei X_3 , îi corespunde, după cum se știe (v. §17), matricea cosinuşilor

$$\|c_{i'k}\| = \begin{vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (\text{F.25})$$

Substituind elementele ei în formula (F.10) sau direct în expresiile explicite ale matricelor P și Q prin $c_{i'k}$, vom găsi că matricea P , pentru o rotație a sistemului de coordonate în jurul axei X_3 cu unghiul φ , are forma

$$\|P_{\mu}^{\lambda'}\| = \begin{vmatrix} \cos^2\varphi & \sin^2\varphi & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\sin 2\varphi \\ \sin^2\varphi & \cos^2\varphi & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\sin 2\varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ -\sin 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 & 0 & 0 & \cos 2\varphi \end{vmatrix}, \quad (\text{F.26})$$

matricea Q deosebindu-se de matricea P numai prin aceea că coeficienții $1/2$ se află nu în colțul superior drept, ci în cel inferior stâng.

Pentru § 53. Modulul lui Young, $E(q)$, și modulul de forfecare, $G(p, q)$. Și din produsele dintre componentele unui vector se pot forma tot niște mărimi de tipul ε_λ sau σ^λ . Într-adevăr, produsele posibile a două componente ale aceluiași vector (să zicem q) sînt componentele unui tensor simetric de rangul doi, qq

$$(qq)_{ij} = q_i q_j.$$

Trecînd de la perechea de indici, $i, j = 1, 2, 3$, la un singur indice, $\lambda = 1, \dots, 6$, componentele diadei qq se pot scrie atît sub formă de componente covariante ale unui vector cu șase dimensiuni,

$$(qq)_\lambda = \begin{cases} q_i q_j & \text{pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3, \\ 2q_i q_j & \text{pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6, \end{cases} \quad (F.27)$$

cît și în formă de componente contravariante ale lui,

$$(qq)^\lambda = q_i q_j \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6). \quad (F.28)$$

Care anume dintre aceste forme este recomandată într-un caz sau altul depinde de tipul mărimii ce trebuie înmulțită. Dacă se calculează modulul Young,

$$E(q) = (s_{ijkl} q_i q_j q_k q_l)^{-1},$$

atunci înmulțirea se face cu componentele covariante, $s_{\lambda\mu}$; în mod corespunzător, mărimea qq trebuie să fie reprezentată prin componentele contravariante $(qq)^\lambda$, deoarece indicii de însumare se află obligatoriu la niveluri diferite. Astfel,

$$E^{-1}(q) = s_{\lambda\mu} (qq)^\lambda (qq)^\mu. \quad (F.29)$$

Vom utiliza modul de scriere de aici numai la tensorii simetrici. Din produsele componentelor a doi vectori diferiți (să zicem p și q) se pot forma componentele unui tensor simetric de rangul doi

$$\frac{1}{2} (pq + qp)_{ij} = \frac{1}{2} (p_i q_j + q_i p_j).$$

Mai departe, ca și în cazul precedent, ele pot fi scrise în oricare dintre următoarele forme

$$\frac{1}{2}(p q + q p)_\lambda = \begin{cases} p_i q_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ p_i q_j + q_i p_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6); \end{cases} \quad (F.30)$$

$$\frac{1}{2}(p q + q p)^\lambda = \frac{1}{2}(p_i q_j + q_i p_j) \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6). \quad (F.31)$$

Pentru calcularea modului de forfecare, $G(p, q)$, folosim componentele contravariante $1/2(pq + qp)^\lambda$, deoarece valorile tabelate, $s_{\lambda\mu}$, sînt covariante. Ca urmare a faptului că tensorul s_{ijkl} este simetric în raport cu prima și cu cea de-a doua pereche de indici,

$$G^{-1}(p, q) = 4s_{ijkl}p_i q_j p_k q_l = s_{ijkl}(p_i q_j + q_i p_j)(p_k q_l + q_k p_l). \quad (F.32)$$

De aici, obținem din nou relația

$$G^{-1}(p, q) = s_{\lambda\mu}(pq + qp)^\lambda(pq + qp)^\mu. \quad (F.33)$$

Pentru § 56. Viteza undelor elastice în cristale. Viteza unei unde elastice longitudinale,

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl} m_i m_j m_k m_l}, \quad (F.34)$$

poate fi scrisă, evident, în forma

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c^{\lambda\mu}(mm)_\lambda(mm)_\mu}. \quad (F.35)$$

Faptul că pentru coeficienții de elasticitate indicii sînt scriși sus, ne obligă ca pentru diada mm să-i luăm jos, de unde și rezultă regula de recalculare

$$(mm)_\lambda = \begin{cases} m_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2m_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (F.36)$$

În cazul general, viteza unei unde elastice este

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl} m_i p_j m_k p_l}. \quad (F.37)$$

Vom introduce tensorul simetric de rangul doi,

$$L = \frac{1}{2}(mp + pm).$$

Evident,

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl} L_{ij} L_{kl}} = \sqrt{\frac{1}{\rho} c^{\lambda\mu} L_{\lambda} L_{\mu}}, \quad (F.38)$$

aplicând următoarele reguli de calcul

$$L_{\lambda} = \begin{cases} L_{ij} = m_i p_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2L_{ij} = m_i p_j + p_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \quad (F.39)$$

Pentru § 58. Coeficienții piezoelectricei, d. Ecuațiile teoriei efectului piezoelectric,

$$D_i = \kappa_{ij} E_j + 4\pi d_{i\mu} \sigma^{\mu}, \quad \varepsilon_{\lambda} = d_{j\lambda} E_j + s_{\lambda\mu} \sigma^{\mu}, \quad (F.40)$$

ne dau regulile de calcul pentru coeficienții piezoelectricei. Remarcăm că indicii notați cu litere latine se scriu, ca și pînă acum, pe un singur nivel, regulile de calcul,

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases} \quad (F.41)$$

depinzînd numai de indicii notați cu litere grecești. Formulele de transformare pentru mărimile $d_{i\mu}$ sînt următoarele

$$d_{i'\mu'} = c_{i'j} P_{\mu}^{\nu} d_{j\nu}, \quad d_{j\nu} = c_{i'j} Q_{\nu}^{\mu'} d_{i'\mu'}. \quad (F.42)$$

Pentru §§ 61, 62. Coeficienții piezoelectricei, e. Ecuațiile teoriei efectului piezoelectric, de forma,

$$D_i = \kappa_{ij} E_j + 4\pi e_i^{\mu} \varepsilon_{\mu}, \quad \sigma^{\lambda} = -e_j^{\lambda} E_j + c^{\lambda\mu} \varepsilon_{\mu}, \quad (F.43)$$

conduc, pentru coeficienții e_i^{μ} , la următoarele reguli de calcul

$$e_i^{\mu} = e_{ikl} (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6) \quad (F.44)$$

și la formule de transformare de forma

$$e_{i'}^{\mu'} = c_{i'j} Q_{\nu}^{\mu'} e_j^{\nu}, \quad e_j^{\nu} = c_{i'j} P_{\mu}^{\nu} e_{i'}^{\mu'}. \quad (F.45)$$

Prin același procedeu se pot obține regulile de calcul și formulele de transformare și pentru alți coeficienți, care caracterizează proprietățile piezoelectrice ale cristalelor.

Pentru § 74. Tensorii prin care se exprimă efectele neliniare. Scrierea dezvoltării (74.3) cu indici covarianți și cu indici contravarianți,

$$\tilde{D}_i = \tilde{\chi}_{ik} E_k + d_{i\mu} \sigma^\mu + \tilde{R}_{ikl} E_k E_l + 2P_{ik\mu} E_k \sigma^\mu + Q_{i\mu\nu} \sigma^\mu \sigma^\nu, \quad (\text{F.46, a})$$

$$\varepsilon_\lambda = d_{k\lambda} E_k + s_{\lambda\mu} \sigma^\mu + P_{k\lambda l} E_k E_l + 2Q_{k\lambda\mu} E_k \sigma^\mu + L_{\lambda\mu\nu} \sigma^\mu \sigma^\nu, \quad (\text{F.46, b})$$

determină relațiile dintre $P_{ik\mu}$, $Q_{i\mu\nu}$, $L_{i\mu\nu}$ și componentele tensorilor corespunzători din formulele (74.4): pentru realizarea egalității, acestea din urmă trebuie înmulțite cu 2^m , m fiind numărul cifrelor de patru, de cinci sau de șase dintre indicii λ , μ , ν . Analog se definește și tensorii care exprimă elasticitatea neliniară — v. formulele (74.5)–(74.7). Cu ajutorul indicilor covarianți și al celor contravarianți, ele se scriu sub forma

$$c^{\lambda\mu} = c_0^{\lambda\mu} + g^{\lambda\mu\nu} \sigma^\nu, \quad (\text{F.47})$$

$$c^{\lambda\mu} = c_0^{\lambda\mu} + C^{\lambda\mu\nu} \varepsilon_\nu, \quad (\text{F.48})$$

de unde rezultă și regulile de recalculare: $C^{\lambda\mu\nu}$ coincide totdeauna cu C_{ijklmn} , iar

$$g_\nu^{\lambda\mu} = \begin{cases} g_{ijklmn} & (mn \leftrightarrow \nu = 1, 2, 3), \\ 2g_{ijklmn} & (mn \leftrightarrow \nu = 4, 5, 6). \end{cases}$$

Pentru § 75. Coeficienții piezorezistivi și coeficienții elasto-rezistivi. Formulele (75.3) și (75.5) pot fi scrise sub forma

$$E_i = \rho_{ik}^0 (\delta_{kl} + \Pi_\mu^l \sigma^\mu) j_l, \quad (\text{F.49})$$

$$E_i = \rho_{ik}^0 (\delta_{kl} + m^{\lambda\mu} \varepsilon_\mu) j_l. \quad (\text{F.50})$$

În acest caz se presupune că indicele λ coincide cu perechea de indici kl , scrierea lui sus rezultând din faptul că j_k și j_l sînt componente ale unui vector (dacă regulile de recalculare ar corespunde scrierii jos a indicelui λ , formulele (F.49) și (F.50) ar da o valoare dublă a corecțiilor piezorezistive pentru j_k în cazurile în care $l \neq k$). Poziția indicilor μ este determinată de regulile generale de recalculare pentru σ^μ și ε_μ .

Formula (F.50) duce la reguli de recalculare și la formule de transformare pentru $m^{\lambda\mu}$, care corespund exact cu formulele obținute mai înainte pentru coeficienții de elasticitate $c^{\lambda\mu}$ — v. formulele (F.17), (F.21) și (F.23). Pentru coeficienții piezorezistivi, Π_{λ}^{μ} , relația (F.49) duce la regulile de calcul (75.7), cu care corespund formulele de calcul asemănătoare

$$\Pi_{\mu}^{\lambda'} = Q_{\nu}^{\lambda'} P_{\mu}^{\nu}, \quad \Pi_{\lambda}^{\nu} = P_{\lambda'}^{\nu} Q_{\mu}^{\lambda'} \Pi_{\lambda'}^{\mu}. \quad (\text{F.51})$$

Pentru § 77. Coeficienții piezooptici, coeficienții elastooptici și coeficienții Kerr. Pentru scrierea ecuațiilor efectului piezooptic cu indici covarianți și cu indici contravarianți este foarte importantă alegerea regulilor de recalculare pentru variațiile indicatricii optice. Mai răspândite sînt regulile de calcul care corespund formei ζ^{λ} — ele sînt utilizate, în particular, de către Nye (1967). Lor le corespund ecuațiile

$$\zeta^{\lambda} = \pi_{\mu}^{\lambda} \sigma^{\mu}, \quad (\text{F.52})$$

$$\zeta^{\lambda} = p^{\lambda\mu} \varepsilon_{\mu}. \quad (\text{F.53})$$

Regulile de recalculare pentru π_{μ}^{λ} sînt la fel ca și cele pentru coeficienții Π_{μ}^{λ} . Din această cauză, coeficienților π_{μ}^{λ} le sînt aplicabile și formulele de transformare (F.51). Poziția indicilor la coeficienții $p^{\lambda\mu}$ este aceeași ca și la coeficienții elastorezistivității, $m^{\lambda\mu}$, și la coeficienții de elasticitate, $c^{\lambda\mu}$. Aceasta conduce la regulile de recalculare (F.17) și la formulele de transformare (F.21) și (F.23).

Efectul Kerr se studiază în același mod. Deoarece pentru diada EE se ia forma

$$(EE)^{\mu} = E_k E_l (kl \leftrightarrow \mu = 1, \dots, 6), \quad (\text{F.54})$$

coeficienților Kerr, K_{μ}^{λ} , li se aplică aceleași reguli de recalculare și formule de transformare ca și coeficienților piezooptici, π_{μ}^{λ} .

Pentru § 77. Coeficienții electrooptici. Regulile de recalculare aplicate lui ζ^{λ} , în cazul variației indicatricii optice, duc la scrierea ecuațiilor efectului electrooptic (77.16) sub forma

$$\zeta^{\lambda} = r_k^{\lambda} E_k \quad (\text{F.55})$$

și, respectiv, la regulile de calcul pentru coeficienții electrooptici (77.18). Formulele de transformare pentru r_k^{λ} sînt analoge formulelor (F.45) pentru coeficienții piezoelectrice, e_i^{μ}

$$r_k^{\lambda'} = Q_{\mu}^{\lambda'} c_{k\mu} r_l^{\mu}, \quad r_l^{\mu} = P_{\lambda'}^{\mu} c_{k\mu} r_{\lambda'}^{\lambda}. \quad (\text{E.56})$$

NOTAȚIILE MAI IMPORTANTE FOLOSITE IN TEXT

Simbolurile Miller sau simbolurile Bravais ale planurilor sau ale fețelor sînt puse în paranteze rotunde, (...), simbolurile direcțiilor sau ale muchiilor, în paranteze drepte, [...], simbolurile formei simple sau ale seturilor de planuri de simetrie echivalente, în acolade, {...}, ale unui fascicul de direcții echivalente, în paranteze de tipul <...>. Semnul minus dintr-un simbol se scrie deasupra cifrei.

Vectorii se notează cu litere aldine cursive ale alfabetului latin, de pildă, ***p***, ***n***, ***V***.

Tensorii se notează cu litere ale alfabetului latin, aldine, drepte, și cu litere grecești, aldine, de exemplu, ***s***, ***T***, ***κ***.

Produsul scalar se notează cu punct, (\cdot), iar cel vectorial cu semnul ori (\times).

δ_{ij}^x , δ_{ij} — tensorul lui Kronecker

$\delta^{\alpha\beta\gamma}$, $\delta_{\alpha\beta\gamma}$, δ_{ijk} — pseudotensorul Levi-Civita

***a*₁**, ***a*₂**, ***a*₃** — vectorii fundamentali ai rețelei

***a*¹**, ***a*²**, ***a*³** — vectorii fundamentali ai rețelei reciproce

***e*₁**, ***e*₂**, ***e*₃** — versorii unui sistem de coordonate cartezian (de obicei, cristalo-fizic)

X, ***Y***, ***Z*** — axele unui sistem de coordonate cristalografic

***X*₁**, ***X*₂**, ***X*₃** — axele unui sistem de coordonate cartezian (de obicei, cristalo-fizic)

***P*_{αβ}**, ***Q*_{βγ}**, ***P*_{λμ}**, ***Q*_{μν}** — matricele transformării coordonatelor rectilinii generale

***c*_{ij}** — matricea transformării coordonatelor carteziene (matricea cosinurilor)

***r*_{ij}** — matricea rotației coordonatelor carteziene

E — vectorul intensitate a cîmpului electric

H — vectorul intensitate a cîmpului magnetic

D — vectorul inducție a cîmpului electric

P — vectorul polarizare

κ, ***κ*_{ij}** — tensorul permitivității dielectrice

η, ***η*_{ij}** — tensorul impermitivității dielectrice

λ, ***λ*_{ij}** — tensorul coeficienților conductibilității termice

k, ***k*_{ij}** — tensorul coeficienților difuzabilității

ρ, ***ρ*_{ij}** — tensorul rezistivității

m — vectorul unitar al normalei de undă

s — vectorul unitar al razei

***N*_o**, ***N*_e** — indicii de refracție principali ai cristalelor uniaxe

***N*₁**, ***N*₂**, ***N*₃** sau ***N*_o**, ***N*_m**, ***N*_p** — indicii de refracție principali ai cristalelor biaxe

***n*₁**, ***n*₂**, și ***n*_o**, ***n*_e** — indicii de refracție pentru o direcție arbitrară de propagare a luminii

χ — caracterul reprezentării (în §§ 47 și 66)

u — vectorul deplasare

ε, ***ε*_{ij}**, ***ε*_λ** — tensorul micilor deformări

ω, ***ω*_{ij}** — tensorul micilor rotații

φ, ***φ*_i** — vectorul axial al micilor rotații

σ, ***σ*_{ij}**, ***σ*_λ** — tensorul tensiunilor (în §§ 32 și 76 — tensorul conductibilității electrice)

α, α_{ij} — tensorul dilatării termice (în §§ 26, 27 și 80 — tensorul susceptibilității dielectrice, în §70 — tensorul coeficienților termoelectrice)
 $s, s_{ijkl}, s_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților deformabilității elastice
 $c, c_{ijkl}, c_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților de elasticitate
 U — energia internă pe unitatea de volum
 Φ — potențialul termodinamic pe unitatea de volum
 S — entropia pe unitatea de volum
 T — temperatura
 C — căldura specifică pe unitatea de volum
 $d, d_{ijkl}, d_{i\mu}$ — tensorul coeficienților piezoelectrice
 x_A, x_a — coordonatele termodinamice generalizate
 X_A, X_a — forțele termodinamice generalizate
 $\Pi, \Pi_{ijkl}, \Pi_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților piezorezistivi
 $m, m_{ijkl}, m_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților elastorezistivi
 J_a — fluxurile generalizate în termodinamica proceselor ireversibile
 K_a — forțele conjugate fluxurilor în termodinamica proceselor ireversibile
 \mathcal{E}_{ab} — coeficienții cinetici
 $\pi, \pi_{ijkl}, \pi_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților piezooptici
 $p, p_{ijkl}, p_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților elastooptici
 $r, r_{ijk}, r_{\lambda k}$ — tensorul coeficienților electrooptici
 $K, K_{ijkl}, K_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienților Kerr
 χ, χ_{ijk} — tensorul susceptibilității dielectrice pătratică
 θ, θ_{ijkl} — tensorul susceptibilității dielectrice cubice
 G, G_{ij} — pseudotensorul de rotație

Indicii :

$\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$ corespund axelor sistemului cristalografic de coordonate; se pot afla în poziție superioară sau inferioară,

$i, j, k, l = 1, 2, 3$ corespund unui sistem cartezian de coordonate (de obicei, cristalofizic),

$\lambda, \mu, \nu, \kappa = 1, \dots, 6$ permit înlocuirea a doi indici tensoriali cu unul singur; în textul principal (începând cu capitolul 6) se află în poziția inferioară, în anexă în poziția inferioară și în poziția superioară,

$A, B, C, D = 0, \dots, 9$ — în notațiile forțelor și coordonatelor termodinamice generalizate, incluzând temperatura și entropia, și corespunzând matricelor termodinamice (cap. 7),

$a, b, c, d = 1, \dots, 9$ — în notațiile forțelor și coordonatelor generalizate termodinamice, exclusiv temperatura și entropia, și corespunzând matricelor termodinamice (cap. 7 și § 74),

$a, b, c, d = 1, \dots, 9$ — în notațiile fluxurilor, forțelor conjugate lor și matricelor coeficienților cinetici (§76).

Cazurile în care indicii se utilizează în alt sens sau capătă alte valori au fost menționate în text.

BIBLIOGRAFIE

- Aero, E. L., Kuvşinski, E. V. (1960), „FTT”, 2, 1399.
- Ahmanov, S. A. (1969), *Nelineinai optika*, în cartea *Kvantovata elektronika, malenkaia enĭklopediia*, p. 119, Sov. enĭklopediia.
- Ahmanov, S. A., Hohlov, R. V. (1964), *Problemi nelineinai optiki*, VINITI, M.
- Agranovici, V. M., Ghinzburg, V. L. (1965), *Kristallografika s uĭolom stranstvennoi dispersii i teoriia eksitonov*, Nauka.
- Agranovici, V. M., Ghinzburg, V. L. (1972), „JETP”, 63, 838.
- Akivis, M. A., Goldberg, V. V. (1969), *Tenzornoe iscisleie*, Nauka.
- Aleksandrov, V. N. (1970), „Kristallografiia”, 15, 996.
- Aleksandrov, K. S. (1956), „Kristallografiia”, 1, 718.
- Aleksandrov, K. S. (1958), „Kristallografiia”, 3, 620.
- Aleksandrov, K. S. (1962), „Kristallografiia”, 7, 735.
- Aleksandrov, K. S., Zinenko, V. I., Mihelson, L. M., Sirotin, I. I. (1969), „Kristallografiia”, 14, 327.
- Aleksandrov, K. S., Rijova, T. V. (1961), „Kristallografiia”, 6, 289.
- Aleksandrov, K. S., Rijova, T. V. (1964), „Kristallografiia”, 9, 373.
- Ambarĭumean, S. A. (1967), *Teoria anizotropnih plastin*, Nauka.
- Andronov, A. A. (1960), „Izv. vuzov, Radiotekhnika”, 3, 45.
- Astrov, D. N. (1960), „JETP”, 38, 984.
- Barkovski, L. M. (1970), „Vestn. Belorussk. un-ta, ser. 1”, nr. 2, 42.
- Belov, K. P. (1959), *Magnitne prevraŭcenii*, Fizmatgiz.
- Belov, K. P., Beleancikova, M. A., Lavitin, R. Z., Nikitin, S. A. (1965), *Redkozemelnye ferro- i antiferromagnetiki*, Nauka.
- Belov, N. V. (1947), *Struktura ionnih kristallov i metaliceskih faz*, Izd-vo AN SSSR.
- Belov, N. V. (1951), *Strukturnaia kristallografiia*, Izd-vo AN SSSR.
- Belov, N. V. (1951), a), „Tr. In-ta kristallografi AN SSSR”, 6, 25.
- Belov, N. V. (1957), „Kristallografiia”, 2, 678.
- Belov, N. V. (1958), „Kristallografiia”, 3, 246.
- Belov, N. V. (1962), „Mineral.”, sb. Lvovsk. gheol. ob-va, 16, 41.
- Belov, N. V., Klevĭova, R. F. (1959), „Kristallografiia”, 4, 289, 473.
- Belov, N. V., Neronova, N. N., Smirnova, T. S. (1955), „Tr. In-ta kristallografi AN SSSR”, 11, 33, sau (1957), „Kristallografiia”, 2, 315.
- Belov, N. V., Tarhova, T. N. (1956), „Kristallografiia”, 1, 4, 619.
- Belov, E. N., Belov, N. V., Ŗubnikov, A. V. (1948), „Dokl. AN SSSR”, 63, 669.
- Beresteĭki, V. B., Lifŭit, E. M., Pitaevski, L. P. (1968), *Releativistskaia kvantovata teoriia*, vol. I, Nauka.
- Bhagavantam, S. (1966), *Crystal Symetry and Physical Properties*, Acad. Press, Lond. — NY.
- Bhagavantam, S., Suryanarayana, D. (1949), „Acta crystalogr.”, 2, 21.
- Bhagavantam, S., Venkatarayudu, T. (1959), *Teoriia grupp i ei primenente k fiziceskim problemam*, IL.
- Bir, L. G., Pikus, G. E. (1972), *Simetriia i deformaĭionnye effekti v poluprovodnikah*, Nauka.
- Birss, R. (1962), „Proc. Phys. Soc.”, 79, 946.
- Birss, R. (1964), *Symmetry and Magnetism*, Holland Publ. Co.

- Blombergen, N. (1965), *Nonlinear Optics*, W. B. Benjamin, Inc. New York.
- Bokl, G. B. (1940), „Tr. Lab. kristallografii AN SSSR”, 2, 13.
- Bokl, G. B. (1971), *Kristallografiia*, Nauka.
- Bokut, B. V., Serdlukov, A. N. (1971), „JETP”, 61, 1808.
- Bokut, B. V., Serdlukov, A. N., Flodorov, F. I. (1970), „Kristallografiia”, 15, 1002.
- Boldirev, A. K. (1934), *Kristallografiia*, Gorgheonefizdat.
- Boldirev, A. K. (1936), „Am. Mineral”, 21, 731.
- Borisenko, A. I., Tarapov, I. E. (1966), *Vektornii analiz i naceala tenzornogo iscsle-*
niia, Vissiaia skola.
- Born, M. (1933), *Optik*, Springer, Berlin.
- Born, M., Wolf, E. (1964), *Principles of Optics*, Pergamon Press.
- Born, M., Huang, K. (1958), *Dinamicheskaia teorii kristaliceskih rešetok*, IL.
- Borovik-Romanov, A. S. (1959), „JETP”, 36, 1954.
- Borovik-Romanov, A. S. (1960), „JETP”, 38, 1088.
- Boyle, L. L., Lawrenson, J. E. (1972), „Acta crystallogr.”, A28, 485, 489.
- Bravais, O. (1974), *Izbrannie naucnie trudi*, Nauka.
- Brewster, D. (1818), „Trans. Roy. Soc. Edimb.”, 18, 281.
- Brout, R. (1967), *Fazovii perehodii*, Mir.
- Burfoot, J. (1970), *Vvedenie v fiziku segnetoelektriceskih iavlenii*, Mir.
- Buerger, M. J. (1965), *Elementary Crystallography*, J. Wiley & Sons.
- Buerger, M. J. (1970), *Contemporary Crystallography*, McGraw-Hill Book Co.
- Buerger, M. J. (1948), *Riontghenoskaia kristallografiia*, IL.
- Burkhardt, J. J. (1947), *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie*, Verlag Birk-
häuser, Basel.
- Butabaev, S. M., Sirotin, I. I. (1972), „Kristallografiia”, 17, 1181.
- Butabaev, S. M., Sirotin, I. I. (1973), „Kristallografiia”, 18, 195.
- Butabaev, S. M., Smislov, I. I. (1971), „Kristallografiia”, 16, 796.
- Cady, W. (1949), *Piezoelektricesvo i ego prakticeskie primenenia*, IL.
- Chern, M.-J., Phillips, R. A. (1970), „J. Opt. Soc. Amer.”, 60, 1230.
- Cochran, W., Zia, A. (1968), „Phys. stat. solidi”, 25, 273.
- Codarcea, A. (1965), *Mineralogie*, vol. I, *Cristalografia*, Ed. didactică și pedagogică,
București.
- Crystallographic Book List* (1965), ed. by H. Megaw, Int. Union of Crystallography.
- Curie, M. (1968), *Piotr Kiuri*, Nauka.
- Curie, P. (1966), *Izbrannie trudi*, Nauka.
- Delone, B., Padurov, N., Aleksandrov, A. (1934), *Matematiceskie osnovii strukturnogo*
analiza kristallov, Gostehizdat.
- Delone, B. N., Galiulin, R. V., Storghin, M. I. (1974), *Teorii Brave i eto obobscenie*
na n-mernie rešetki, in lucrarea Brave (1974).
- Diurelli, A., Raili, U. (1970), *Vvedenie v fotomehaniku*, Mir.
- Ditchbern, R. (1965), *Fiziceskaia optika*, Nauka.
- Döring, W. (1958), „Ann. Physik [7]”, 1, 104.
- Dvořak, V. (1971), „Ph. s. stat. solidi(b)”, 45, 147.
- Dvořak, V., Petzelt, J. (1971), „Czech. J. Phys.”, B21, 1147.
- Dzealoșinski, I. E. (1957), „JETP”, 33, 807.
- Dzealoșinski, I. E. (1959), „JETP”, 37, 881.
- Dzealoșinski, I. E. (1964), „JETP”, 46, 1420.
- Dzealoșinski, I. E. (1964, a), „JETP”, 47, 336, 992.
- Ehyshima, K., Ogawa, T. (1971), „J. Phys. Soc. Japan”, 31, 308.
- Escher, M. C. (1961), *The Graphic Work*, Oldbourne Press, Lond.
- Fabelinski, I. L. (1965), *Molekularnoe rasseianie sveta*, Nauka.
- Fadceav, D. K. (1961), *Tablii osnovnih unitarnih predstavlenii fiodorovskih grupp*,
Izd-vo AN SSSR.
- Farneel, G. W. (1961), „Canad. J. Phys.”, 39, 865.
- Fel'man, R. P., Leighton, R. B., Sands, M. (1969), *Fizica modernă*, Ed. tehnică.
- Fleschl, R., Fumf, F. G. (1953), „Nuovo Cimento”, 10, 865.
- Flodorov, E. S. (1949), *Simmetriia i struktura kristallov*, Izd-vo AN SSSR.

- Flodorov, F. I. (1958), *Optika anizotropnih sred*, Izd-vo AN SSSR.
- Flodorov, F. I. (1959), „Optika i spektroskopija”, 6, 337.
- Flodorov, F. I. (1959, a), „Optika i spektroskopija”, 6, 85.
- Flodorov, F. I. (1965), *Teorija uprugih voln v kristallah*, Nauka.
- Flodorov, F. I. (1970), „Kristallografia”, 15, 631, 638.
- Flint, E. E. (1956), *Praktičeskoe rukovodstvo po gheometricheskoj kristallografii*, Gosgheoltekhizdat.
- Fumi, F. G. (1951), „Phys. Rev.”, 83, 1274.
- Fumi, F. G. (1952), „Acta crystallogr.”, 5, 44, 691.
- Fumi, F. G. (1952, a), „Nuovo Cimento”, 9, 739.
- Fumi, F. G. (1952, b), „Phys. Rev.”, 86, 561.
- Gaiu, R. J. (1962), *Struktura kristallov, Izbrannye trudy*, Izd-vo AN SSSR.
- Gherman, V. L. (1945), „Dokl. AN SSSR”, 48, 95.
- Ghinzburg, V. L. (1949), „UFN”, 38, 430.
- Goldenblat, I. I. (1969), *Nelineinnye problemy teorii uprugosti*, Nauka.
- Groot de, S., Masour, P. (1964), *Neravnovesnaja termodinamika*, Mir.
- Groth, P. (1897), *Fizicheskaja kristallografija i vvedenie k izučeniju kristallograficheskikh svoystv vajnejših soedinenij*, sub redacția și cu completările lui Levinsohn-Lessing, Izd-vo K. L. Rikera, SP6.
- Gufan, I. M. (1971), „FTT”, 13, 225.
- Gufan, I. M., Sahnenko, V. P. (1972), „FTT”, 14, 1915.
- Gufan, I. M., Sahnenko, V. P. (1972, a), „JETP”, 63, 1909.
- Gurevici, G. B. (1948), *Osnovy teorii algebricheskikh invariantov*, Gostehizdat.
- Haaze, R. (1967), *Termodinamika neobratimih procesov*, Mir.
- Hammermesch, M. (1966), *Teoriia grupp i eio primenenie k fizicheskim problemam*, Mir.
- Hanneke, E. G., Green, R. E. (1969), „J. Acoust. Soc. Amer.”, 45, 1367.
- Hatkevici, A. G. (1962), „Kristallografia”, 7, 742.
- Hatkevici, A. G. (1962, a), „Kristallografia”, 7, 916.
- Haceaturean, A. G. (1965), „Dokl. AN SSSR”, 165, 1284.
- Haceaturean, A. G. (1974), *Teoriia fazovih prevraščeni i struktura tvordih rastvorov*, Nauka.
- Heine, W. (1963), *Teoriia grupp v kvantovoi mehanike*, IL.
- Hermann, C. (1934), „Zs. Kristallogr.”, 89, 32.
- Hobden, M. V. (1969), „Acta crystallogr.”, A25, 633.
- Hruška, K., Khogali, A. (1971), „Trans. IEEE”, SU18, 171.
- Iakovlev, I. A. ș.a. (1957), „JETP”, 32, 4; „JETP”, 32, 9; „UFN”, 63, 2; (1956), „DAN”, 107, 5; „Kristallografia”, 1, 1.
- Ianke, E., Emde, F., Lösch, F. (1968), *Spezialne funkții*, Nauka.
- Iliușin, A. A. (1971), *Mehanika sploșnoi sredy*, Izd-vo MGU.
- Indenbom, V. L. (1959), „Kristallografia”, 4, 619.
- Indenbom, V. L. (1960), „Kristallografia”, 5, 115.
- Indenbom, V. L. (1960, a), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.”, 24, 1180.
- Indenbom, V. L., Belov, N. V., Neronova, N. N. (1960), „Kristallografia”, 5, 497.
- Indenbom, V. L., Silvestrova, I. M., Sirotin, I. I. (1956), „Kristallografia”, 1, 599.
- International Tables for X-Ray Crystallography* (1952), vol. I, II, Birmingham.
- Ioffe, A. F. (1932), *Fizika kristallov*, GTTI.
- IRE Standards on Piezoelectric Crystals (1949), „Proc. IRE”, 37, 1378; (1957), „Proc. IRE”, 45, 354; (1958), „Proc. IRE”, 46, 765; (1961), „Proc. IRE”, 49, 1162.
- Ivanov, N. R., Konstantinova, A. F. (1970), „Kristallografia”, 15, 490.
- Iziumov, I. A., Ozerov, R. P. (1966), *Magnitnaja neitronografija*, Nauka.
- Jahn, H. A. (1949), „Acta crystallogr.”, 2, 33.
- Janik, L., Hruška, K. (1970), „Czech. J. Phys.”, B20, 202.
- Jdanov, G. S. (1940), *Osnovy riontghenostрукturnogo analiza*, Gostehizdat.
- Jdanov, G. S. (1961), *Fizika tvordogo tela*, Izd-vo MGU.
- Jeludev, I. S. (1957), „Kristallografia”, 2, 207.

- Jeludev, I. S. (1964), „Kristallografiia”, 9, 501.
- Jeludev, I. S. (1968), *Fizika kristallicheskih dielektrikov*, Nauka.
- Jeludev, I. S. (1972), *Cristale electrice*, Ed. tehnică, București.
- Jeludev, I. S. (1971), „Kristallografiia”, 16, 273.
- Jeludev, I. S. (1973), *Vvedenie v segnetoelektricesstvo*, Atomizdat.
- Jeludev, I. S., Șuvalov, L. A. (1956), „Kristallografiia”, 1, 681.
- Jona, F., Shirane, D. (1965), *Segnetoelektriceskie kristalli*, Mir.
- Känzig, W. (1960), *Segnetoelektriki i antisegetoelektriki*, IL.
- Kaplan, I. G. (1969), *Simetriia mnogoelektronnih sistem*, Nauka.
- Karandeev, V. V. (1913), *Kristallogoptika*, Izd. Višš. jensk. kursov, M.
- Karslow, G., Eger, D. (1964), *Teploprovodnost tvordih tel*, Nauka.
- Kittel, Ch. (1972), *Introducere in fizica corpului solid*, Ed. tehnică, București.
- Kleber, W. (1969), *Einführung in die Kristallographie*, VEB Verlag.
- Kleber, W., Meyer, K., Schoenborn, W. (1968), *Einführung in die Krystallophysik*, Acad. Verlag, Berlin.
- Kleiner, W. H. (1966), „Phys. Rev.”, 142, 318.
- Kleiner, W. H. (1969), „Phys. Rev.”, 182, 318.
- Klimontovici, I. L. (1966), *Kvantovye gheratoroi i nelineinaya optika*, Prosveščenie.
- Konstantinova, A. F., Ivanov, N. R., Greciușnikov, B. N. (1969), „Kristallografiia”, 14, 283.
- Koptik, V. A. (1958), *Nekolorte voprosi fenomenologhiceskoi tenzornoii kristallofiziki*, in lucrarea Wooster (1958).
- Koptik, V. A. (1960), „Kristallografiia”, 5, 932.
- Koptik, V. A. (1966), *Šubnikovskie gruppi*, Izd-vo MGU.
- Koptik, V. A. (1967), „Kristallografiia”, 12, 826.
- Kornfeld, M. I., Ciudinov, A. A. (1957), „JETF”, 33, 33.
- Kostov, I. (1965), *Kristallografiia*, Mir.
- Krincik, G. S., Cetkin, M. V. (1969), „UFN”, 98, 3.
- Krishnan, R. S. (1958), *Progress in Crystal Physics*, vol. I, ed. S. Visvanathan, Madras.
- Krishnan, R. S., Radha, E. S. R. (1971), „J. Phys. D : Appl. Phys.”, 4, 171.
- Krutkov, I. A. (1949), *Tenzor napreajenii i obščie rešenii v statike teorii uprugosti*, Izd-vo AN SSSR.
- Kuvšinski, E. V., Aero, E. L. (1963), „FTT”, 5, 2529.
- Landau, L. D. (1937), „JETF”, 7, 19, sau (1969), *Sobranie trudov*, t. 1, p. 234, Nauka.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1954), *Mehanika splošnih sred*, Gostehizdat.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1957), *Elektrodinamika splošnih sred*, Gostehizdat.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1963), *Kvantovaya mehanika*, Fizmatgiz.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1964), *Statisticeskaia fizika*, Nauka.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1965), *Teoriia uprugosti*, Nauka.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1967), *Teoriia polea*, Nauka.
- Landau, L. D., Lifšit, E. M. (1969), *Mehanika, Elektrodinamika*, Nauka.
- Landolt-Boernstein (1966, 1969, 1971), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series, Groups III: *Crystal and Solid State Physics*, vol. 1, 2, 3; Springer, Berlin-New York.
- Landsberg, G. S. (1957), *Optika*, Gostehizdat.
- Lehnički, S. G. (1947), *Anizotropnie plastinki*, Gostehizdat.
- Lehnički, S. G. (1950), *Teoriia uprugosti anizotropnogo tela*, Gostehizdat.
- Lehnički, S. G. (1971), *Krucenie anizotropnih i neodnorodnih sterjnei*, Nauka.
- Leibenzon, L. S. (1947), *Kurs teorii uprugosti*, Gostehizdat.
- Leibfried, G. (1963), *Mikroskopiceskaia teoriia mehaniceskih i teplovih svoistv kristallov*, Fizmatgiz.
- Lemanov, V. V., Smolenski, G. A. (1972), „UFN”, 103, 465.
- Leminlein, G. G. (1934), „Tr. Lomonosov. in-ta.”, nr. 6, 27.
- Levanluc, A. P., Sannikov, D. G. (1970), „FTT”, 12, 2997.
- Levanluc, A. P., Sannikov, D. G. (1971), „JETF”, 60, 1109.

- Levaniuk, A. P., Sannikov, D. G. (1974), „UFN”, **112**, 561.
- Lifšit, E. M. (1941), „JETF”, **11**, 255.
- Lifšit, I. M., Rozenšveig, L. N. (1947), „JETF”, **17**, 783.
- Lipson, V., Cocren, G. (1956), *Opređenje strukturi kristallov*, IL.
- Liubarski, G. I. (1957), *Teoriia grupp i eio primenenie v fizike*, Gostehizdat.
- Lohin, V. V., Sedov, L. I. (1963), „Prikl. matem. i meh.”, **27**, 393, sau în lucrarea Sedov (1970).
- Lonsdale, K. (1952), *Kristall i riotghenovle luci*, IL.
- Lure, A. I. (1955), *Prostranstvennye zadaci teorii uprugosti*, Gostehizdat.
- Lure, A. I. (1970), *Teoriia uprugosti*, Nauka.
- MacConnel, A. J. (1963), *Vvedenie v tenzornii analiz*, Fizmatgiz.
- Maloletkin, G. N., Fomin, V. L. (1972), *Tenzornie bazisi v kristallofizike*, Izd-vo LGU.
- Mason, W. P. (1952), *Piezoelektriceskie kristalli i ih primenenie v ultraakustike*, IL.
- Mason, W. P. (1966), *Crystal Physics of Interaction Processes*, Acad. Press, New York.
- Mason, W. P. (1967), *Poluprovodnikovye preobrazovатели*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. P. Mason, t. 1, partea B, p. 139, Mir.
- Markovski, V. I., Poluhin, P. I., Šaskolskaia, M. P. (1966), în culegerea *Polearizatsionno-opticeskii metod issledovaniia napreajenii*, p. 69, Izd-vo LGU.
- Melanholin, N. M. (1970), *Metodi issledovaniia opticeskikh svoistv kristallov*, Nauka.
- Mihelson, L. M., Sirotn, I. I. (1969), „Kristallografiia”, **14**, 573.
- Miller, G. F., Musgrave, M. J. P. (1956), „Proc. Roy. Soc.”, **A236**, 352.
- Minnigerode, B. (1887), „Neues Jahrb. Mineral.”, **5**, 145.
- Musgrave, M. J. P. (1954), „Proc. Roy. Soc.”, **A226**, 356.
- Musgrave, M. J. P. (1970), *Crystal Acoustics*, Holden-Day, Inc. Publ., San Francisco.
- Mustel, E. R., Parighin, V. N. (1970), *Metodi moduleafii i skaniruvaniia sveta*, Nauka.
- Naiš, V. E. (1963), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.”, **27**, 1496.
- Nelson, D. F., Lax, M. (1970), „Phys. Rev. Lett.”, **24**, 379.
- Neumann, F. (1885), *Vorlesungen über die Theorie der Elastizität*, Leipzig.
- Noks, G., Gold, A. (1970), *Simmetria v tvordom tele*, Nauka.
- Novojilov, V. V. (1958), *Teoriia uprugosti*, Sudpromghiz.
- Nowacki, W. (1967), „Crystal Data, Amer. Assoc. Crystallogr.”, Monograph. nr. 6.
- Nye J. (1967), *Fiziceskie svoistva kristallov*, Mir.
- Ohmachi, Y., Uchida, N., Niizeki, N. (1972), „J. Acoust. Soc. Amer.”, **51**, 1585.
- Orlov, R. I. (1936), „Izv. vuzov, Radiofizika”, **12**, 1351.
- Pace, N. G., Saunders, G. A. (1971), „J. Phys. Chem. Solids”, **32**, 1585.
- Palmov, V. A. (1964), „Prikl. matem. i meh.”, **28**, 401.
- Pantulu, P. V., Sudarshan, E. (1970), „J. Phys. C : Solid State Phys.”, **3**, 604.
- Pecara, A. (1973), *Novli oblik optiki*, Sovetskoe radio.
- Perelomova, N. V. (1971), *Uprugost kristallov. Uprughie volni v kristallah*, Izd. Mosk. in-ta stali i splavov.
- Perelomova, N. V., Taghieva, M. M. (1972), *Zadacnik po kristallofizike*, Nauka.
- Petrašen, M. I., Trifonov, E. D. (1967), *Primenenie teorii grupp v kvantovoi mehanike*, Nauka.
- Pine, A. S. (1971), „J. Acoust. Soc. Amer.”, **49**, 1026.
- Plešakov, V. F., Sirotn, I. I. (1966), „Prikl. matem. i meh.”, **30**, 243.
- Pockels, F. (1894), „Abh. Göttingen Ges. d. Wiss.”, **39**, 99.
- Pockels, F. (1906), *Lehrbuch der Kristalloptik*, Teubner, Leipzig.
- Popov, G. M., Šafranovski, I. I. (1972), *Kristallografiia*, Viššaia škola.
- Ramachandran G. N., Ramaseshan, S. (1961), *Crystal Optics*, Handbuch der Physik, Bd. 25/1, Springer Verlag, Berlin.
- Ranganath, G. S. (1972), „Proc. Indian. Acad. Sci.”, **A75**, 237.
- Ranganath, G. S., Ramaseshan, S. (1969), „Proc. Indian. Acad. Sci.”, **A70**, 275.
- Raševski, P. K. (1964), *Rimanova gheometriia i tenzornii analiz*, Nauka.
- Rez, I. S. (1967), „UFN”, **93**, 633.
- Scöfnlies, A. (1923), *Theorie der Kristallstruktur*, Akad. Verlag, Berlin.
- Schubert, M., Wilhelmi, B. (1973), *Vvedenie v nelineinuiu optiku*, partea 1, Mir.

- Sedov, L. I. (1962), *Vvedenie v mehaniku splošnoi sredl*, Fizmatgiz.
- Sedov, L. I. (1970), *Mehanika splošnoi sredl*, t. 1, Nauka.
- Shouten, A. I. (1965), *Tenzornti analiz dlea fizikov*, Nauka.
- Sirotin, I. I. (1956), „Kristallografiia”, 1, 708.
- Sirotin, I. I. (1962), „Kristallografiia”, 7, 82.
- Sirotin, I. I. (1965), „Kristallografiia”, 10, 15.
- Sirotin, I. I. (1967), „Kristallografiia”, 12, 208.
- Sirotin, I. I. (1974), „Kristallografiia”, 19, 909.
- Sirotin, I. I., Mihelson, L. M. (1968), „FTT”, 10, 1843.
- Sirotin, I. I., Mihelson, L. M. (1969), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.”, 33, 178.
- Slater, J. (1967), *Insulators, Semiconductors and Metals*, McGraw-Hill Book Company, Ink.
- Smaghin, A. G., Iaroslavski, M. I. (1970), *Piezelektricesstvo kvarča i kvarčevle rezonatori*, Energhila.
- Smith, G. F. (1962), „Arch. Rational Mech. Anal.”, 10, 108.
- Smith, G. F. (1970), „Ann. New York Acad. Sci.”, 172, 57.
- Smith, G. F., Kiral, E. (1969), „Rend. Circ. Mat. Palermo”, 2, 18, 5.
- Smith, G. F., Rivlin, R. S. (1964), „Arch. Rational Mech. Anal.”, 15, 169.
- Smith, G. F., Smith, M. M., Rivlin, R. S. (1963), „Arch. Rational Mech. Anal.”, 12, 93.
- Smolenski, G. A., Bokov, V. A., Iusupov, V. A., Krainik, N. N., Pasinkov, R. E., Šur, M. S. (1971), *Segnetoelektriki i antisegetoelektriki*, Nauka.
- Smolenski, G. A., Krainik, N. N. (1968), *Segnetoelektriki i antisegetoelektriki*, Nauka.
- Smolenski, G. A., Pisarev, R. V., Sinii, I. G., Kolpakova, N. N., Titova, A. G. (1972), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.”, 36, 1219.
- Sonin, A. S., Vasilevskaja, A. S. (1971), *Elektroopticeskie kristalli*, Atomizdat.
- Sonin, A. S., Jeludev, I. S. (1959), „Kristallografiia”, 4, 487.
- Sonin, A. S., Strukov, B. A. (1970), *Vvedenie v segnetoelektricesstvo*, Viššaia škola.
- Steenrod, N., Tshinn, W. (1967), *Pervte poneatitia topologhii*, Mir.
- Stenon, N. (1958), *O tviorom, estestvenno soderjaščemsea v tviorom*, Izd-vo AN SSSR.
- Sušinski, M. M. (1969), *Spektri kombinacionnogo rasseianiia molekul i kristallov*, Nauka.
- Safranovski, I. I. (1968), *Lekcii po kristallomorfologhii*, Viššaia škola.
- Šaskolskaia, M. P. š.a. (1969–1972), *Posobie po fiziceskoi kristallografiu, temi 1–7*, Izv-vo Mosk. in-ta stall i splavov.
- Šcerbakov, V. A. (1972), „Vestn. MGU, ser. fiz. i astronom.”, nr. 2, 195.
- Šubnikov, A. V. (1940), *Simmetriia (zakoni simmetrii i ih primenenie v nauke, tehnike i prikladnom iskusstve)*, Izd-vo AN SSSR.
- Šubnikov, A. V. (1940, a), *Kvarč i ego primenenie*, Izd-vo AN SSSR.
- Šubnikov, A. V. (1949), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.”, 13, 347.
- Šubnikov, A. V. (1951), *Simmetriia i antisimmetriia konecinth figur*, Izd-vo AN SSSR.
- Šubnikov, A. V. (1956), „Kristallografiia”, 1, 95.
- Šubnikov, A. V. (1956, a), „UFN”, 59, 591.
- Šubnikov, A. V. (1958), *Osnovi opticeskoi kristallografiu*, Izd-vo AN SSSR.
- Šubnikov, A. V. (1958, a), *Kristalli v nauke i tehnike*, Izd-vo AN SSSR.
- Šubnikov, A. V. (1963), „Kristallografiia”, 8, 943.
- Šubnikov, A. V., Koptik, V. A. (1972), *Simmetriia v nauke i iskusstve*, Nauka.
- Šubnikov, A. V., Flint, E. E., Boki, G. B. (1940), *Osnovi kristallografiu*, Izd-vo AN SSSR.
- Šuvalov, L. A. (1959), „Kristallografiia”, 4, 399.
- Šuvalov, L. A. (1963), „Kristallografiia”, 8, 617.
- Šuvalov, L. A. (1970), „J. Phys. Soc. Japan”, 28, Suppl., 38.
- Šuvalov, L. A., Ivanov, N. R. (1964), „Kristallografiia”, 9, 363.
- Šuvalov, L. A., Ivanov, N. R., Ciuhladze, O. A., Izraillenko, A. N. (1973), „Kristallografiia”, 18, 1207.

- Șcerbakov, V. A. (1972), „Vestn. MGU, ser. fiz. i astronom.”, nr. 2, 195.
- Tavgher, B. A. (1958), „Kristallografiia”, 3, 339.
- Tavgher, B. A., Zaițev, V. I. (1956), „JETF”, 30, 564.
- Terston, R. (1966), *Rasprostranenie voln v jidkosteah i tverdih telah*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. Mason, t. 1, partea A, p. 13, Mir.
- Terston, R. (1967), *Primenenie poluprovodnikovih preobrazovatelei dlea izmerenii deformajii, uskoreni i smeșcentii*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. Mason, t. 1, partea B, p. 187, Mir.
- Turov, E. A. (1963), *Fiziceskie svoistva magnito uporeadocennih kristallov*, Izd-vo AN SSSR.
- Uzdalev, A. I. (1967), *Nekotorie zadaci termouprugosti anizotropnogo tela*, Izd-vo Saratovsk. un-ta.
- Vaks, V. G. (1973), *Vvedenie v mikroskopiceskulu teoriiu segnetoelektrikov*, Nauka.
- Vakulenko, A. A. (1972), *Polilineinaia algebră i tenzorni analiz v mehanike*, Izd-vo LGU.
- Varikaș, V. M., Haceatrean, I. M. (1969), *Izbrannie zadaci po fizike tvordogo tela*, Vișelsiaia șkola, Minsk.
- Vasilev, D. M. (1972), *Fiziceskaia kristallografiia*, Metallurghia.
- Vedam, K., Srinivasan, R. (1967), „Acta crystallogr.”, 22, 630.
- Veil, G. (1968), *Simmetriia*, Nauka.
- Viswanathan, K. S. (1969), „Indian J. Pure and Appl. Phys.”, 7, 265.
- Vinberg, E. B., Gufan, I. M., Sahnenko, V. P., Sirotin, I. I. (1974), „Kristallografiia”, 19, 21.
- Vloh, O. G. (1971), *Pisma „JETF”*, 13, 118.
- Voigt, W. (1928), *Lehrbuch der Kristallphysik*, Teubner, Leipzig.
- Vonsovski, S. V. (1981), *Magnetismul*, Ed. științifică și enciclopedică, București.
- Voronkova, E. M., Greciușnikov, B. N., Distler, G. I., Petrov, I. P. (1965), *Opticeskie materialy dlea infrakrasnoi tehnikii*, Nauka.
- Wigner, E. (1968), *Teoriia grupp*, IL.
- Wigner, E. (1971), *Etiudi o simmetrii*, Mir.
- Wooster, W. A. (1949), *A Text-Book on Crystal Physics*, Cambridge Univ. Press.
- Wooster, W. A. (1958), *Prakticeskoe rukovodstvo po kristalofizike*, IL.
- Zagalskaia, I. G., Litvinskaia, G. P. (1973), *Gheometriceskaia kristallografiia*, Izd-vo MGU.
- Zamorzaev, A. M. (1957), „Kristallografiia”, 12, 15.
- Zamorzaev, A. M. (1967), „Kristallografiia”, 12, 819.
- Zamorzaev, A. M. (1970), în culegerea *Idei E. S. Fiodorova v sovremennoi kristallografi i mineralogii*, p. 42, Nauka.
- Zarembo, L. K., Krasilnikov, V. A. (1970), „UFN”, 102, 549.



Redactor: VIRGIL SPULBER
Tehnoredactor: CONSTANTIN IORDACHE

Coli de tipar: 47,5. Bun de tipar: 10.08.1981



c. 292 I. P. „Informația”
str. Brezoianu nr. 23—25,
București

62